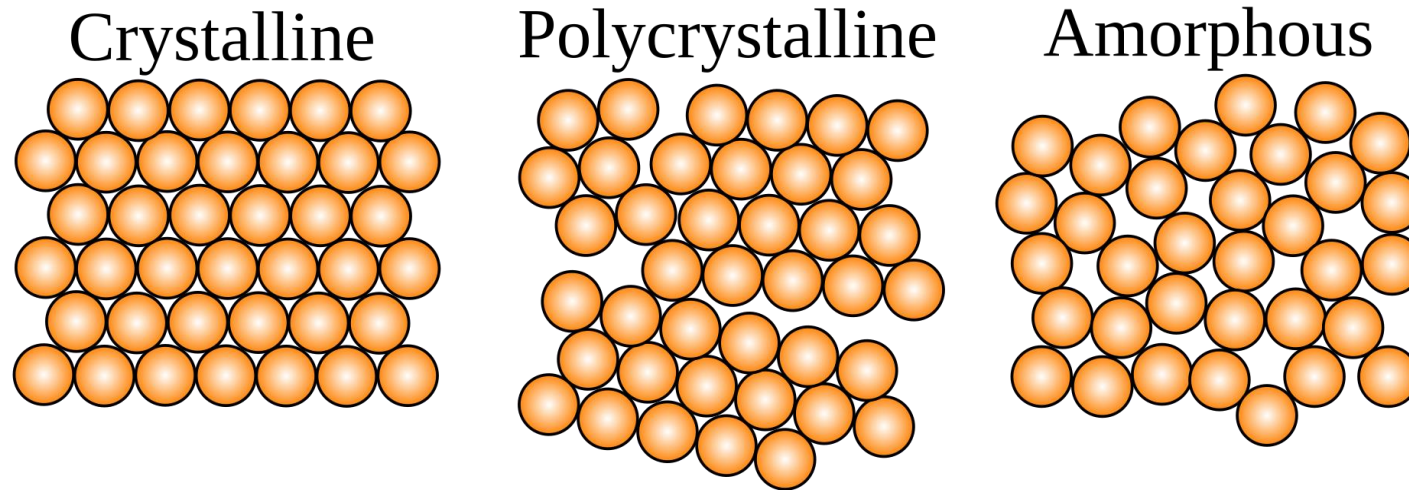
Conceitos de Cristalografia

- David Glotz

• Prefácio:

- A Cristalografia é ,sem sombra de dúvidas, de importância ímpar para áreas das ciências exatas como Química, Física, Geologia, Ciência dos materiais, Engenharias etc. A Cristalografia é essencialmente matemática e lida frequentemente com objetos tridimensionais e bidimensionais as vezes presentes no seu dia a dia mas em sua maioria utópicos e abstratos como já é de costume na Matemática. Afinal de contas... Cristalografia é Inútil? Infelizmente, essa é uma visão que muitos possuem e ao terminar esta obra talvez voce mude sua percepção. Mas, se fosse realmente inútil para que estudá-la não é mesmo? Muitas brincadeiras de matemáticos com o que supostamente era ''inútil'' se transformaram em revoluções incríveis que hoje todos já estamos acostumados... Enfim. Essa área vai muito mais além do que estudar apenas os cristais de forma rígida mas como identificar elementos de simetria, visualização tridimensional e tantas outras que são presentes nas nossas vidas sejam as pessoas conscientes ou inadvertidos disso.
- Esta obra será de fácil entendimento e bastante simplificada se comparada com a amplitude desta área do saber... contará também com exercícios de fixação para qualquer um que esteja no ensino superior e cursando alguma disciplina de Cristalografia ou mesmo para curiosos e interessados em ciência no geral. Ao final teremos a Bibliografia e referencias utilizadas para produzir esta obra assim como as leituras sugeridas e complementares.

- 1) **Conceitos Básicos Iniciais:**

Cristal: '' A **crystal** or **crystalline solid** is a solid material whose constituents (such as atoms, molecules, or ions) are arranged in a highly ordered microscopic structure, forming a crystal lattice that extends in all directions. ''

- Figura 1.0: Representação esquemática das formas cristalina, policristalina e amorfa.

Cristal euédrico – Mineral totalmente limitado por faces bem desenvolvidas.

Cristal subédrico – O mineral apresenta faces parcialmente bem desenvolvidas

Cristal anédrico – O mineral não apresenta qualquer tipo de faces.

- Figura 1.1: Cristais euédricos (**idiomórficos**) , subédricos (**subidiomórfico**) e anédricos (**xenomórficos**) .

- # Defeitos Cristalinos:

- Nenhum Cristal é ''perfeito'' nem mesmo os ditos Euédricos ou Idiomórficos a seguir será apresentado alguns tipos de defeitos em cristais:

- **Tipos de Defeitos**:

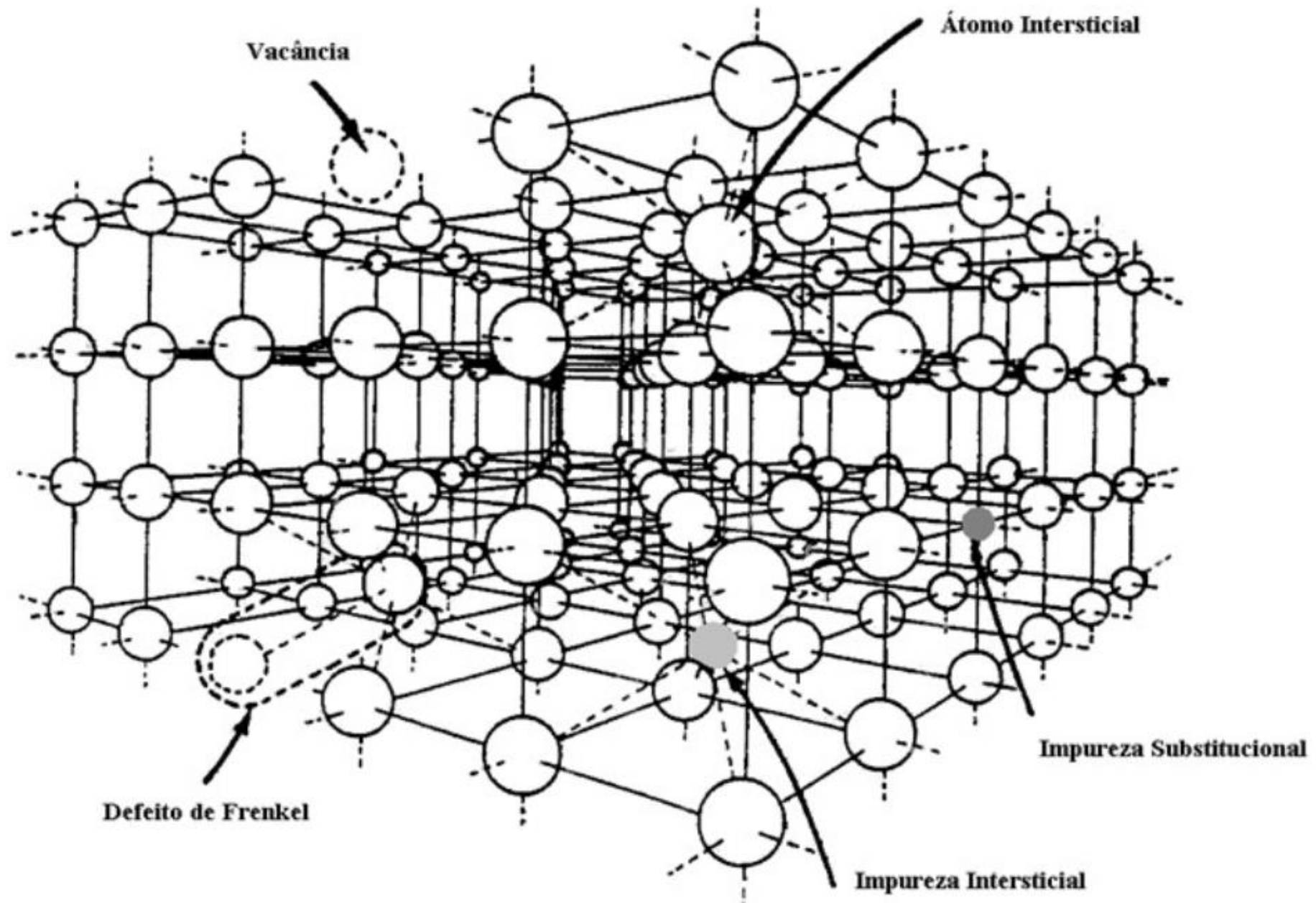
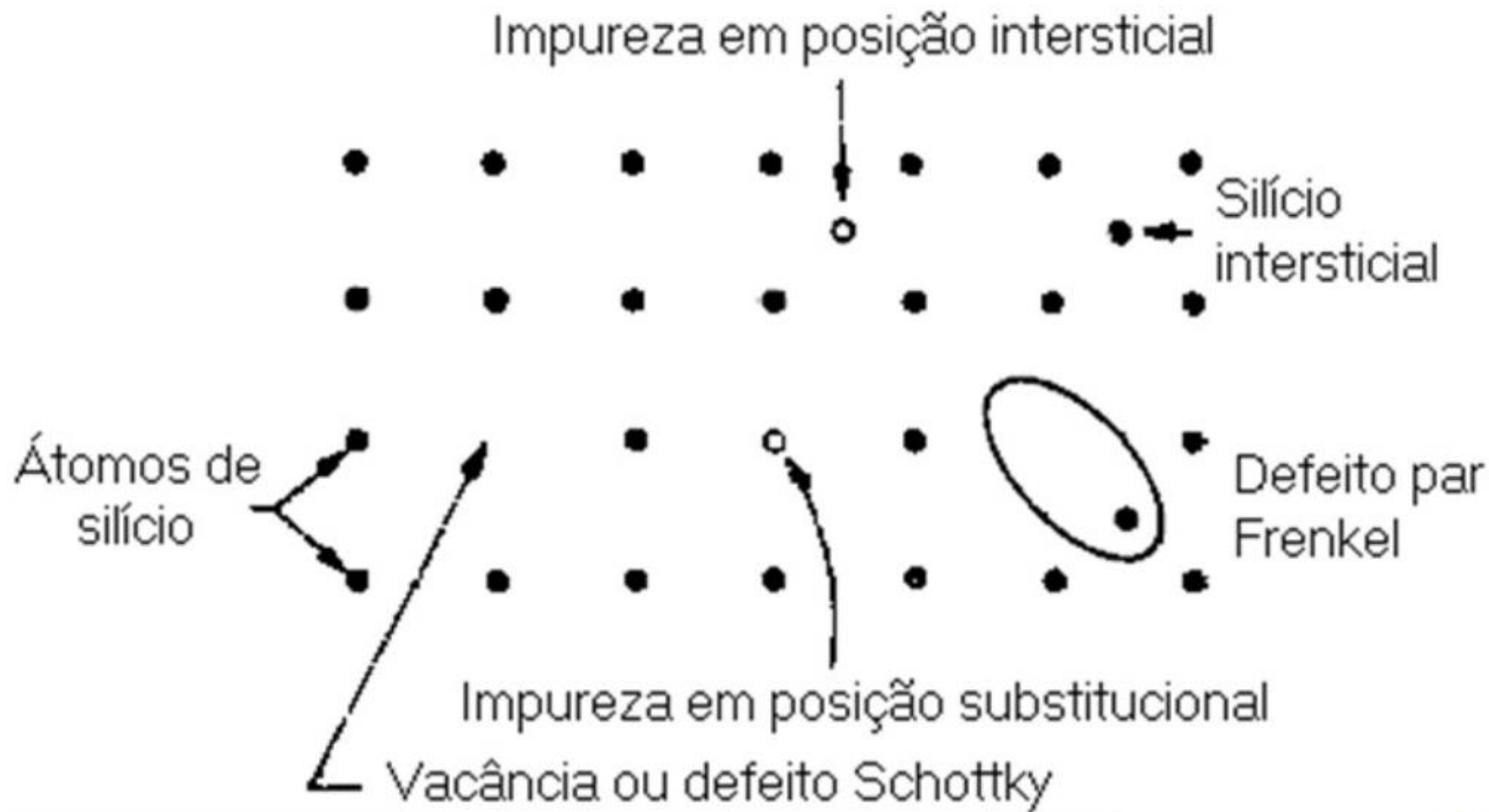
i) Pontuais

ii) Lineares

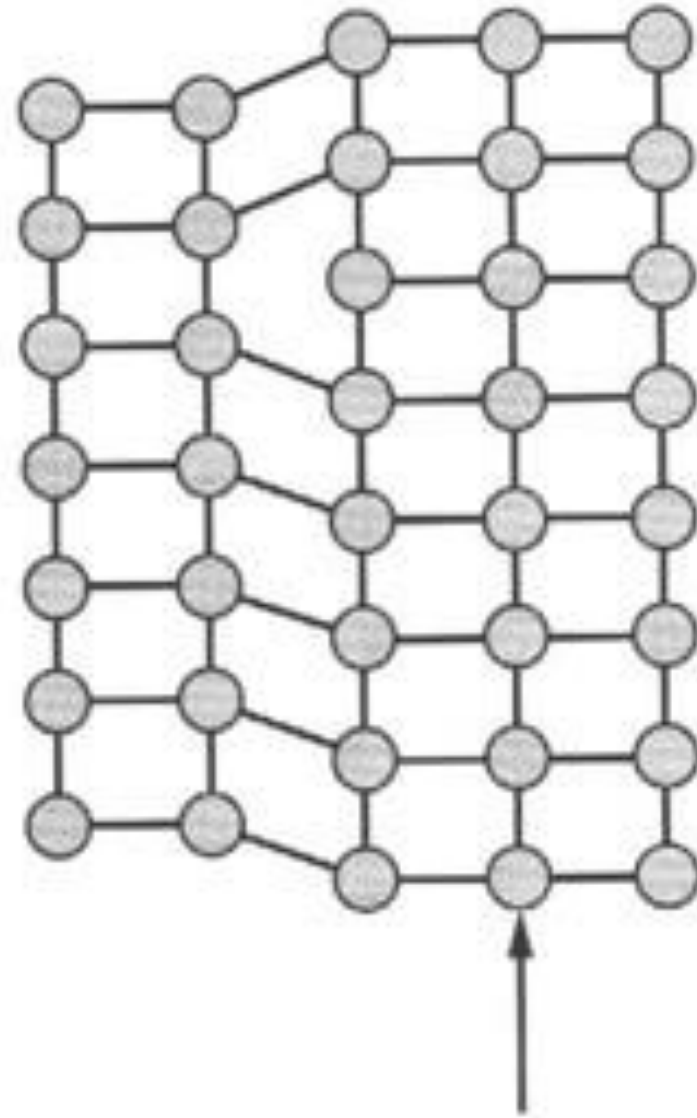
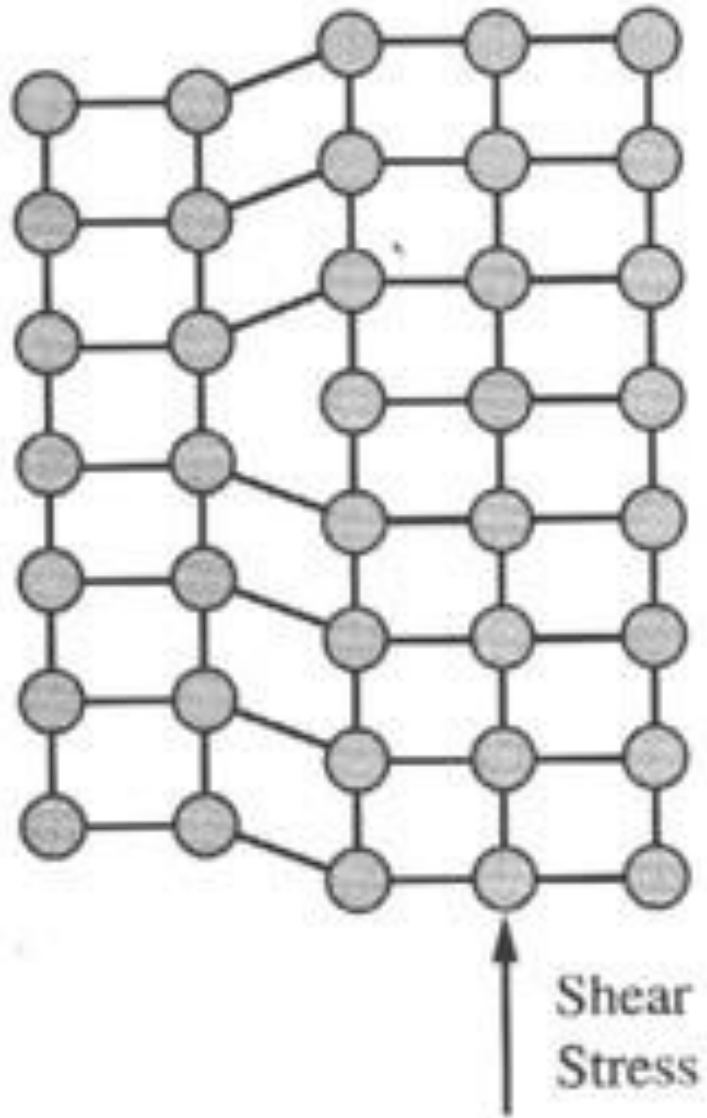
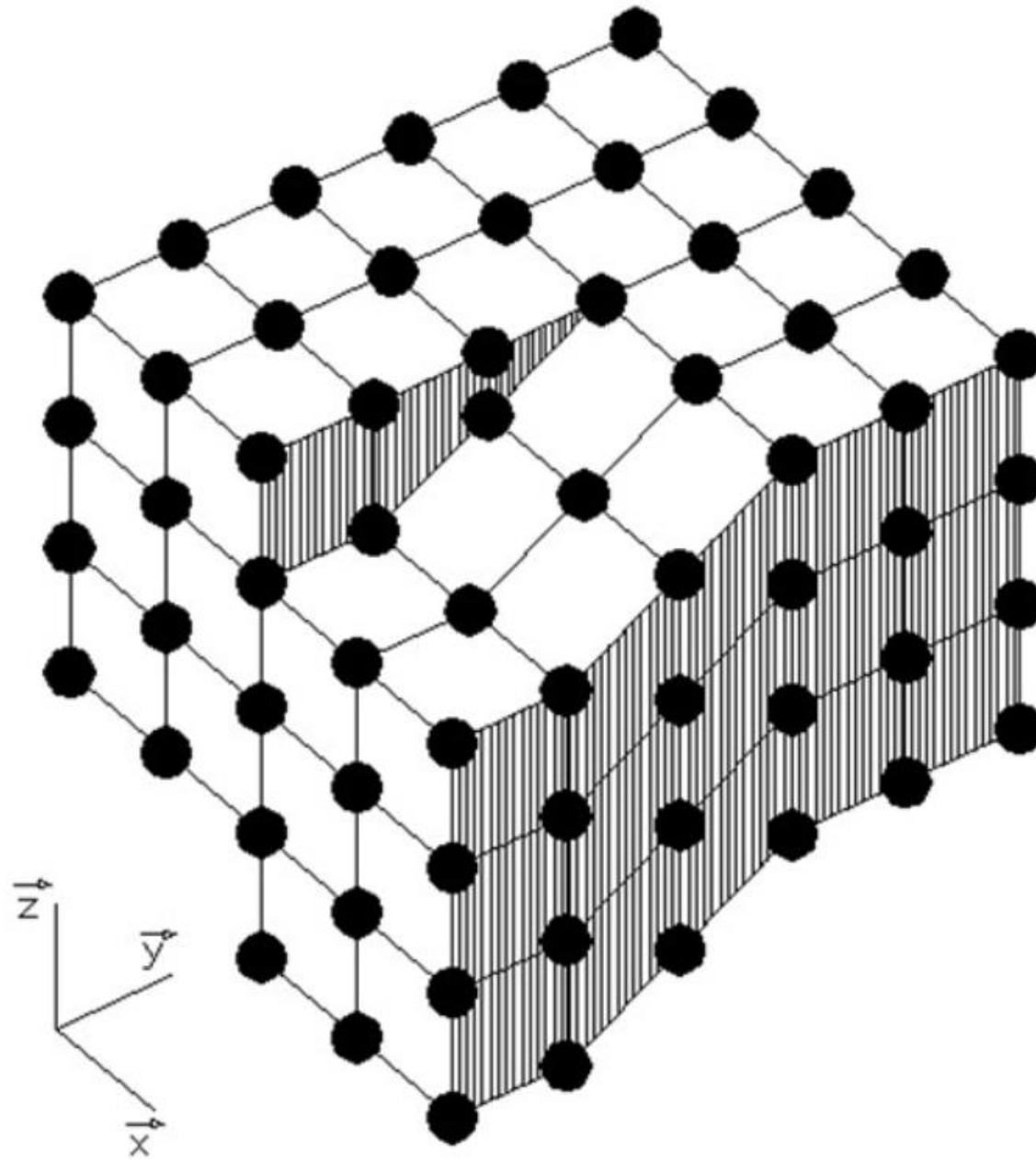
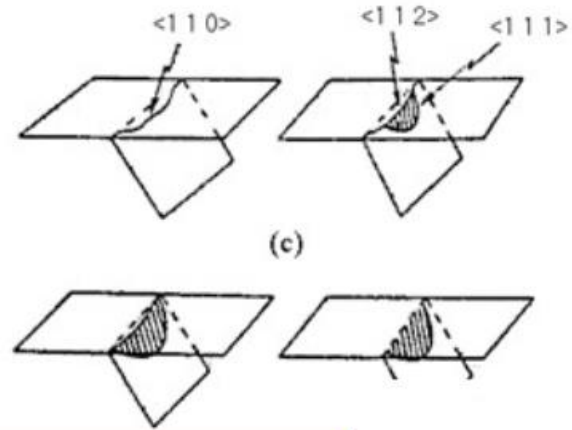
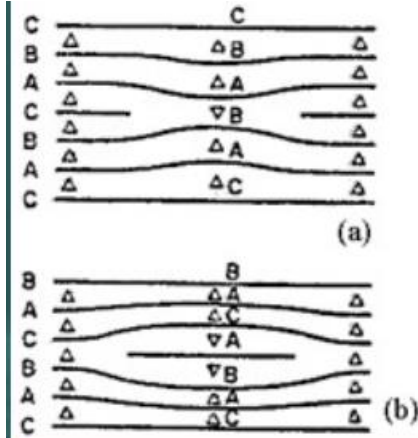
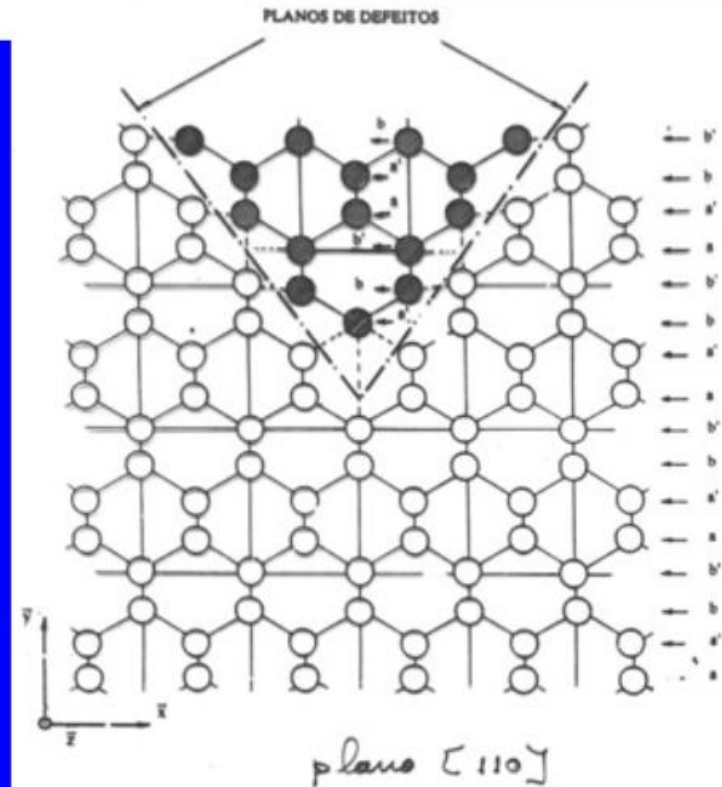
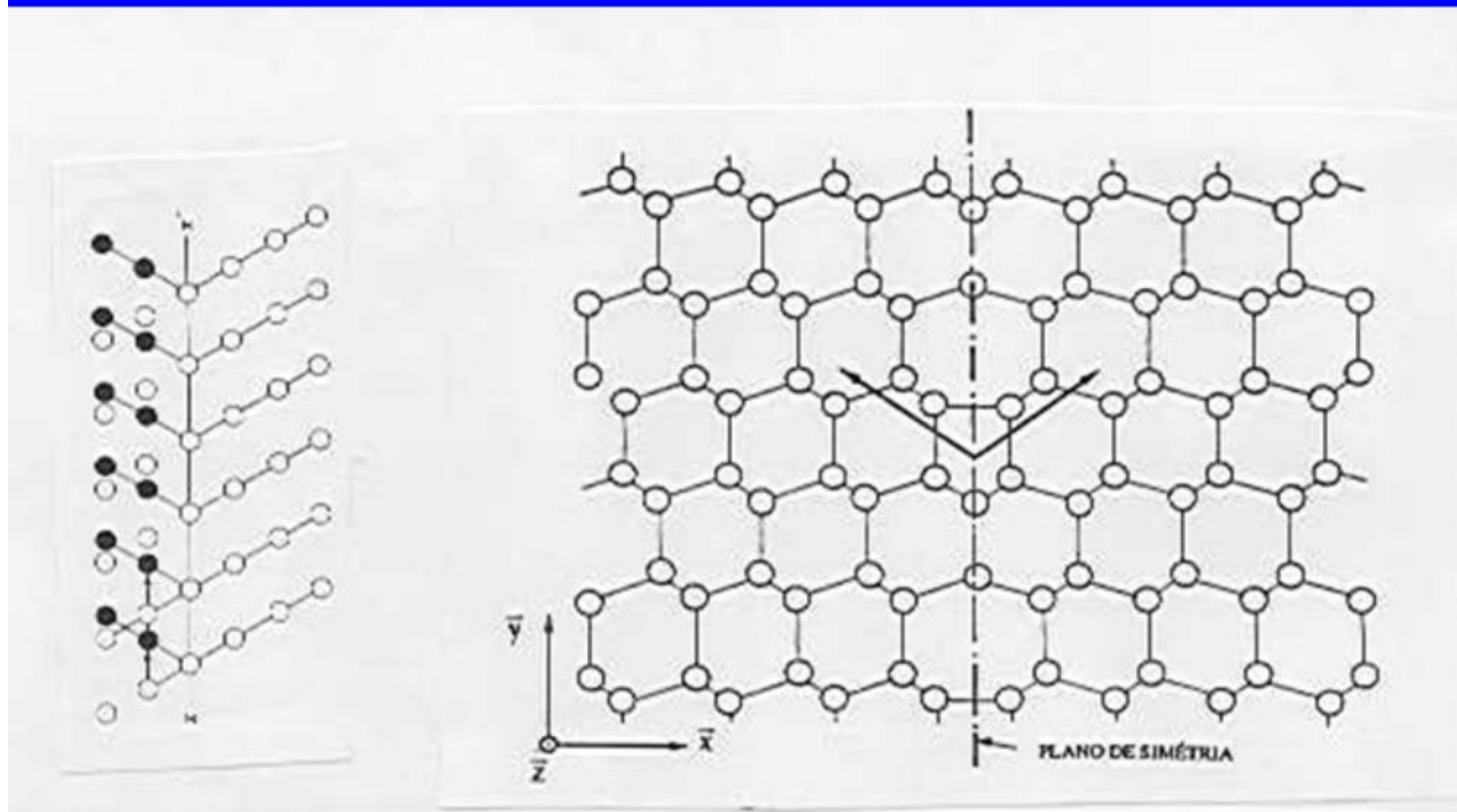
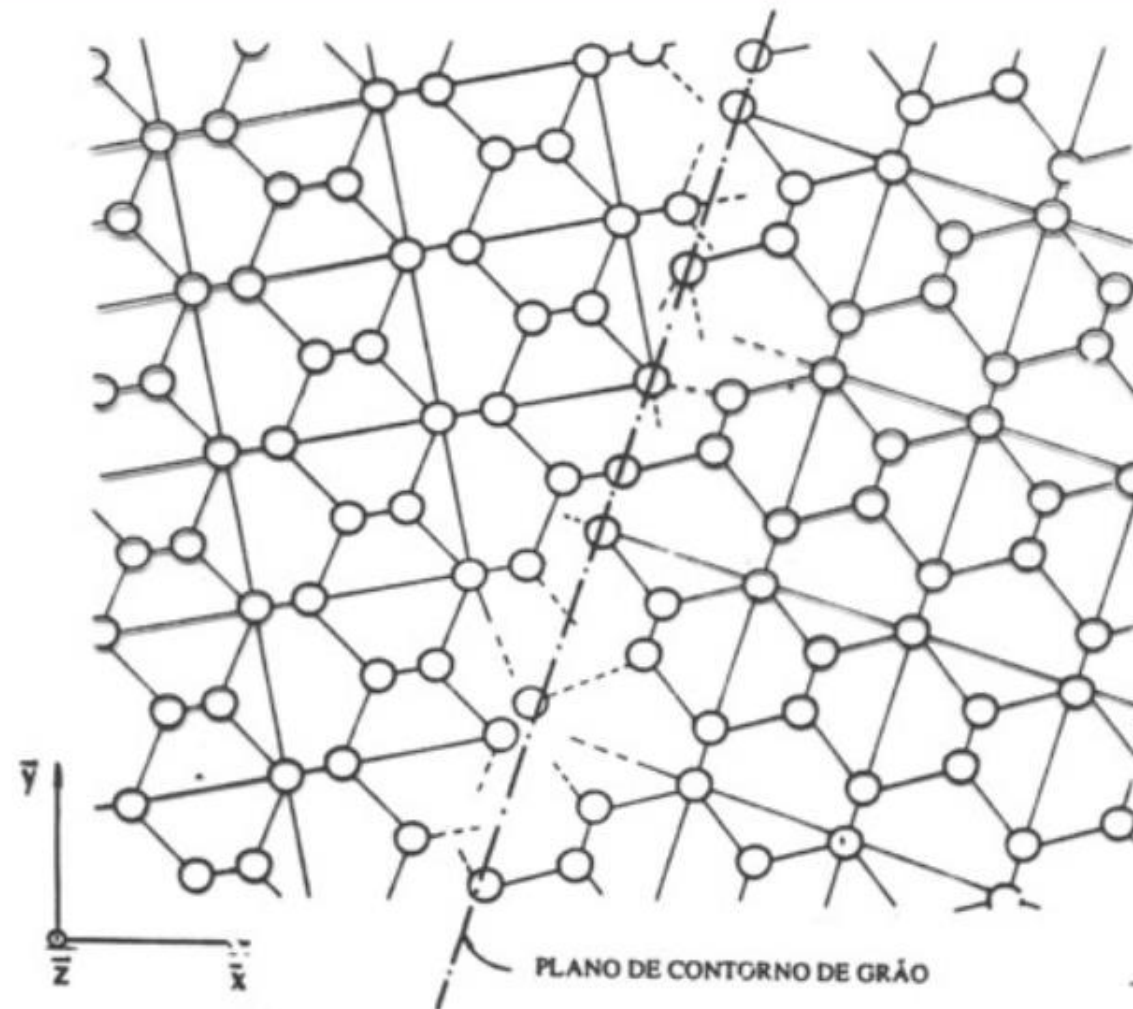
iii) Planares

iii) Volumétricos

i) Pontuais:

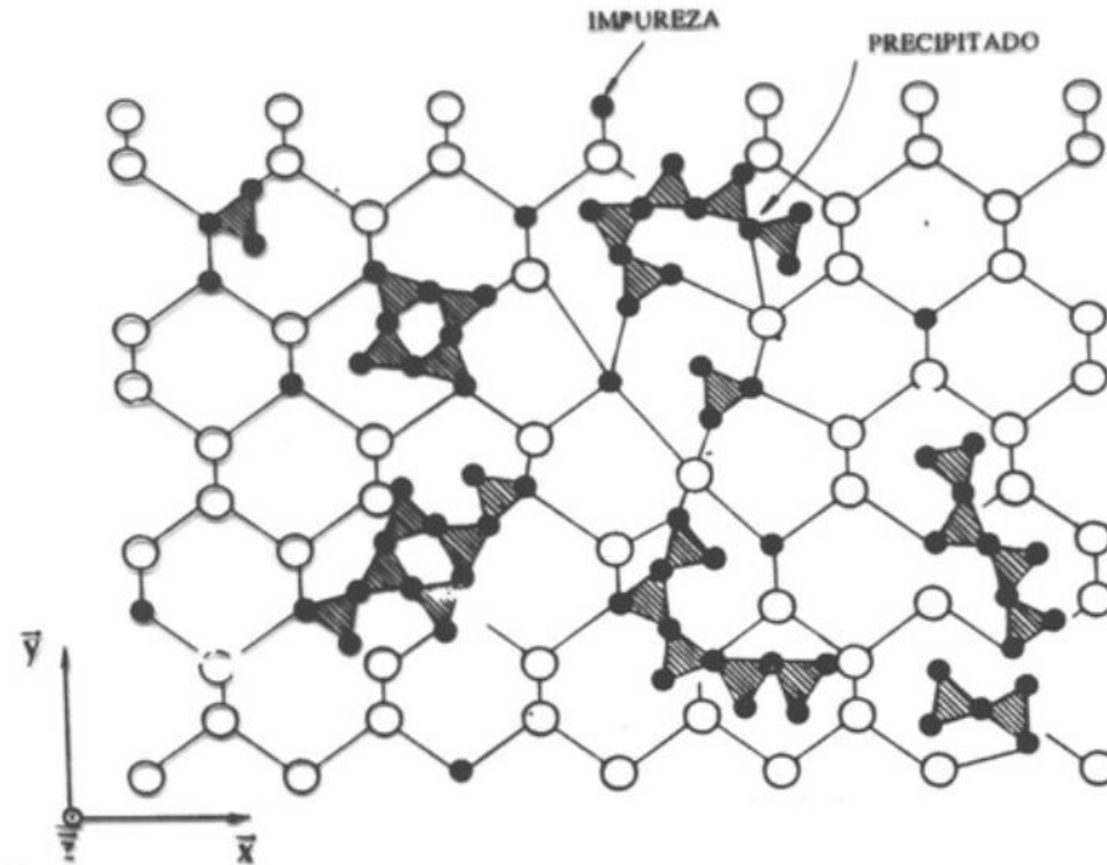
Átomo Intersticial
Vacância
Impureza Substitucional
Defeito de Frenkel
Impureza Intersticial

Densidade de defeitos pontuais cresce com a temperatura (rel. tipo Arrhenius). Ex. vacâncias, onde: N_0 é a densidade do Si, E_{av} a energia de ativação.

$$n_v = N_0 e^{-E_{av}/kT}$$

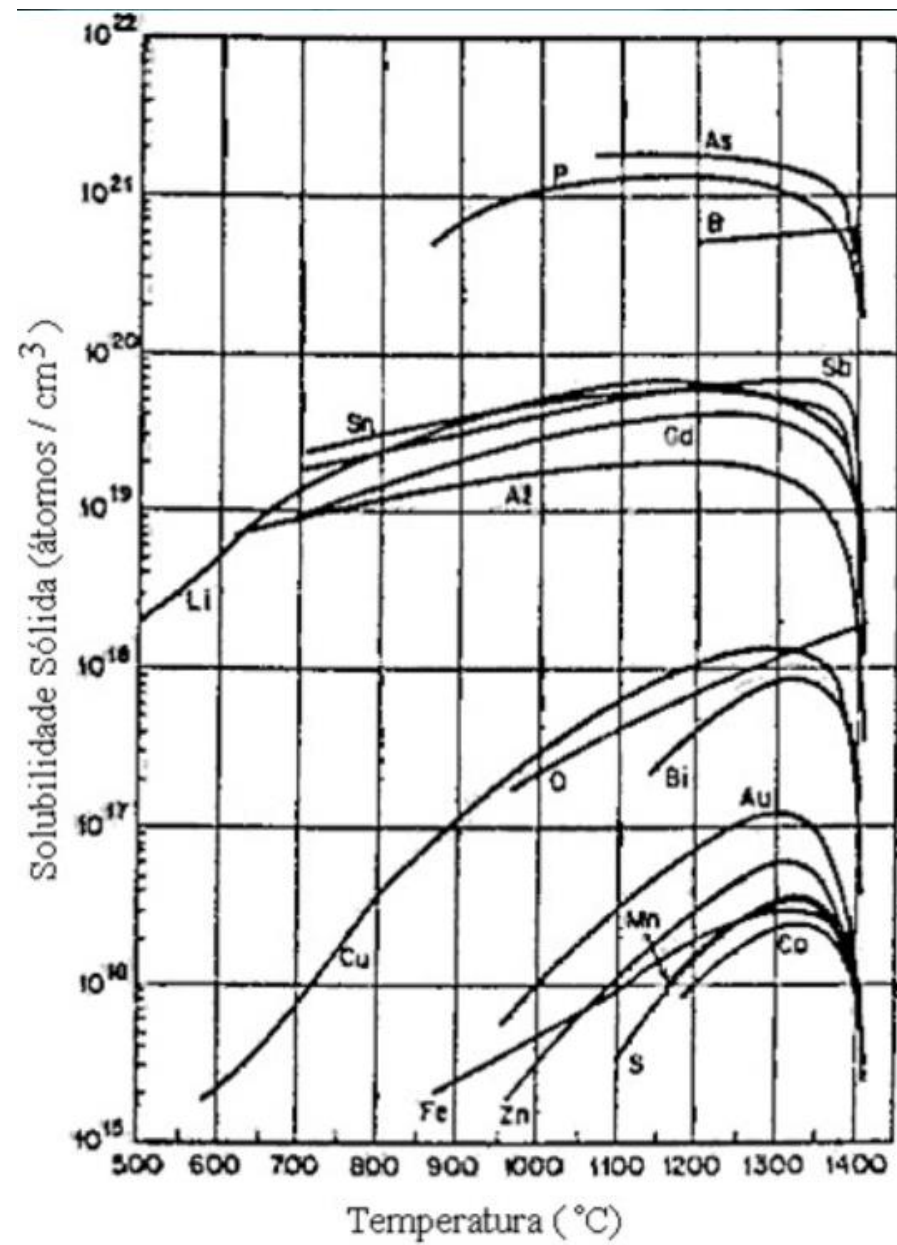
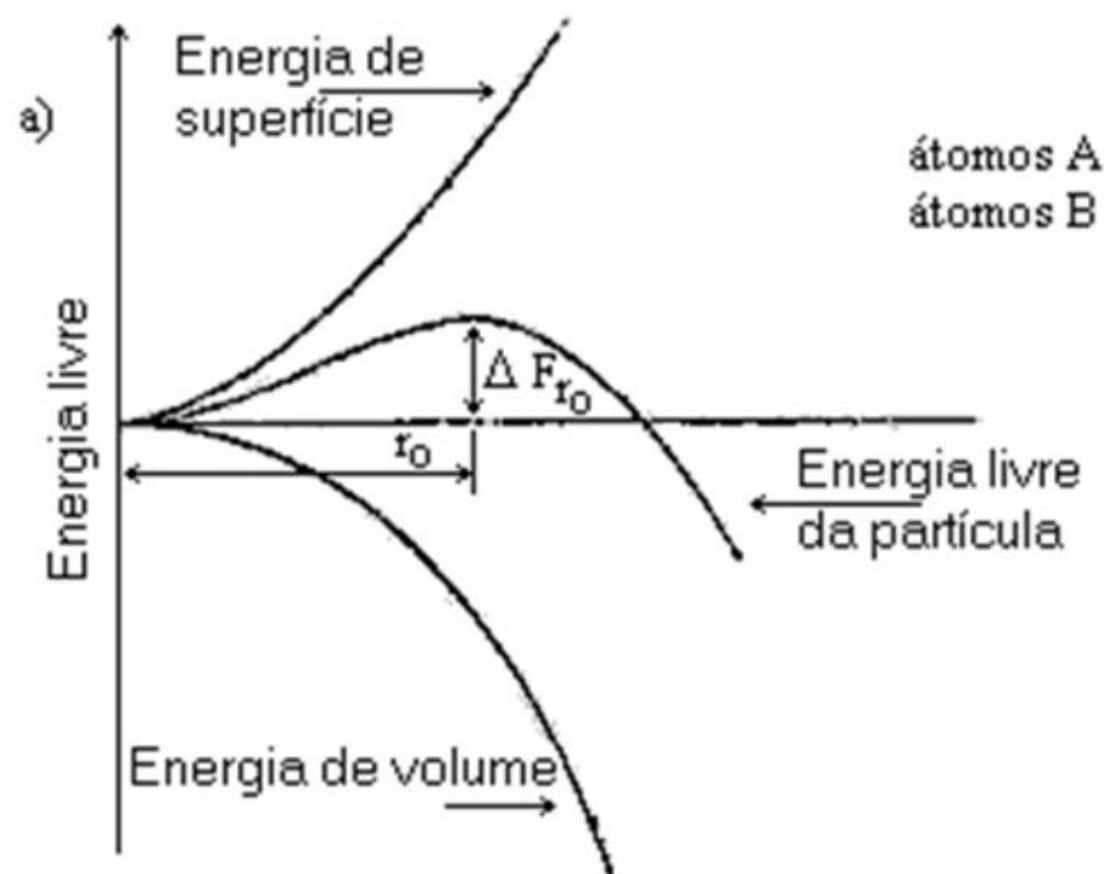
ii) Lineares

Discordância tipo Espiral ou Parafuso:

iii) Planares

Plano de simetria de cristais gêmeos:

Plano de contorno de grão:

No caso do defeito de contorno de grão o número de ligações incompletas e de distorções da rede é muito grande.

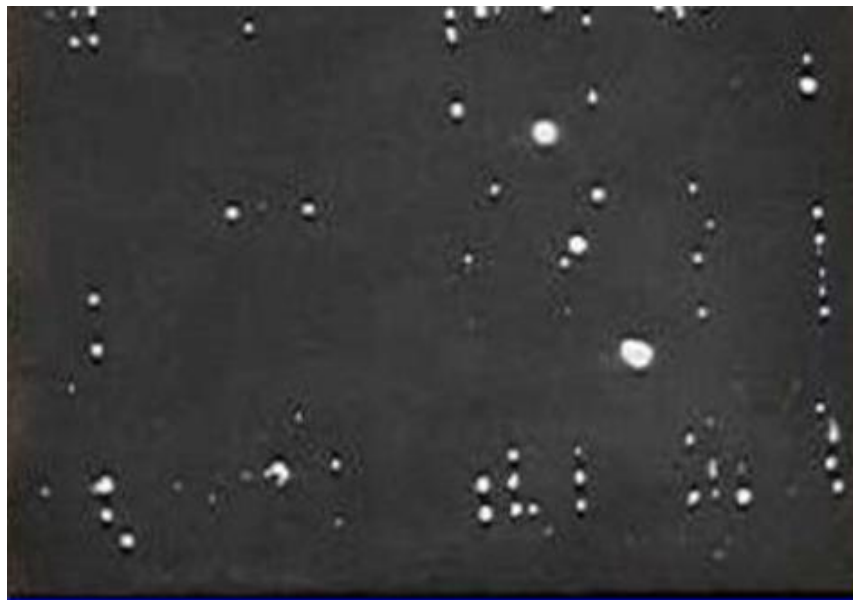
iii) Volumétricos

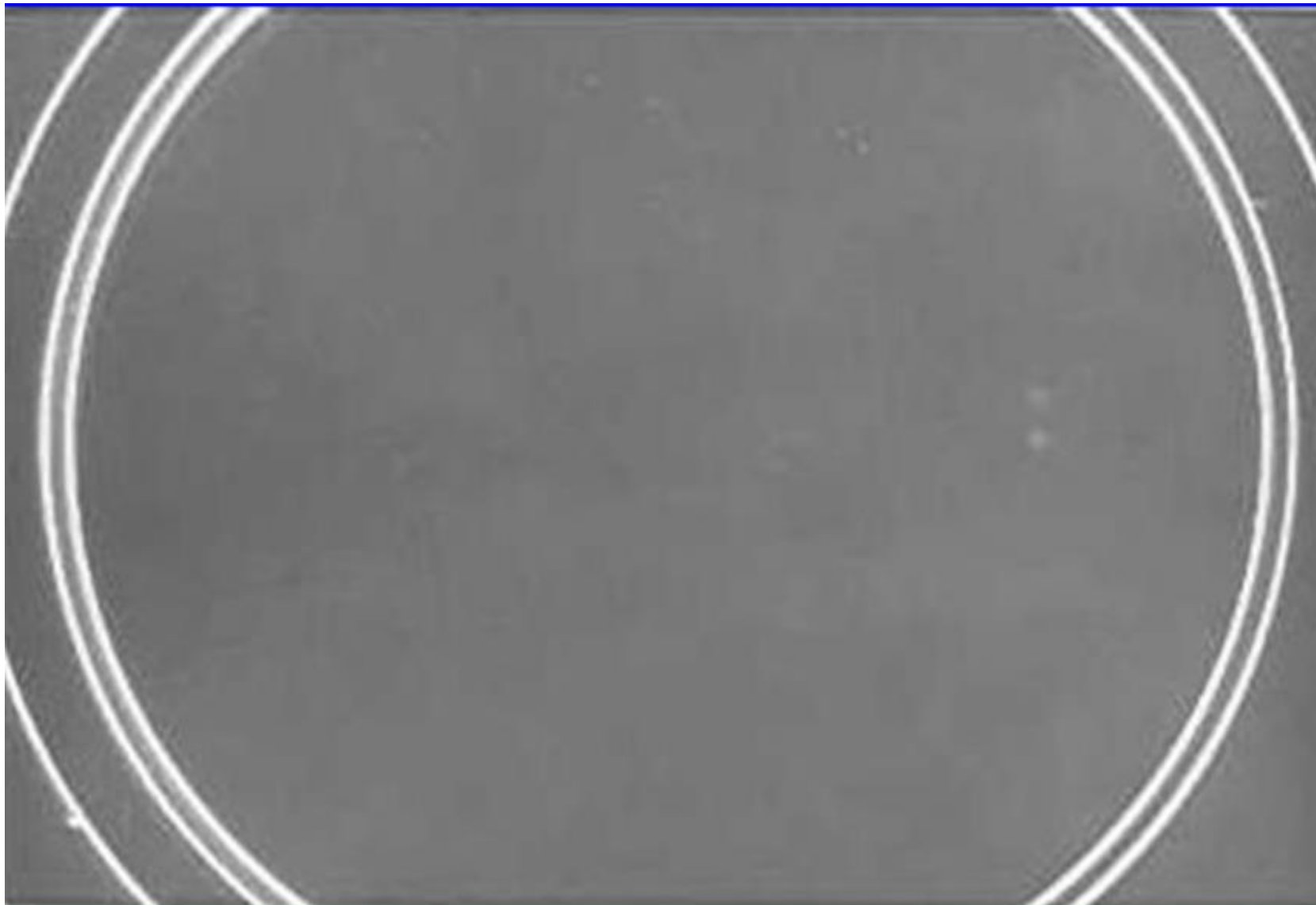
d) Defeitos volumétricos

Precipitados de átomos, ex., O, C, N, dopantes, etc.

A presença de impurezas em níveis próximos ou acima do limite de solubilidade sólida provoca o aparecimento de precipitados com estruturas completamente diferentes da rede cristalina.

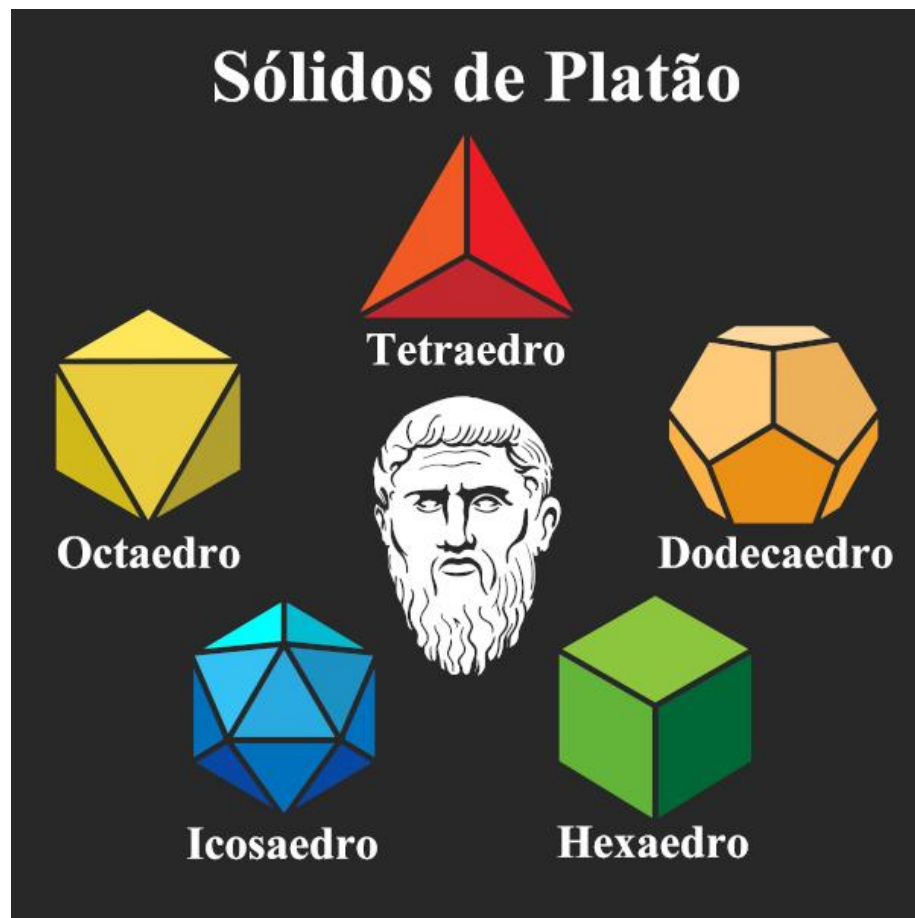
Solubilidade Sólida (átomos / cm3)
Temperatura (°C)
As
P
B
Sb
Sn
Gd
Al
Li
O
Bi
Au
Mn
Co
Cu
S
Fe
Zn

a)
Energia de
superfície
Energia livre
ΔF_{r_o}
r_o
Energia livre
da partícula
Energia de volume
átomos A
átomos B
b)
c)

Revelação de defeitos:

Etching:	Composição:
Sirtl	Cr_2O_3(5M):FH (1:1)
Seeco	$K_2Cr_2O_7$(0.15M):HF ou Cr_2O_3(0.15M):HF (1:2)
Dash	HF:HNO_3:ácido acético (1:3:10)

Discordâncias: a) perpendiculares (280 x) b) paralelas à superfície (55x)

Stacking faults: a) 2 min. etch (55x) e b) 25 min etch (280x)

Área de 420µm de diâmetro, sem defeitos.

• Sólidos de Platão:

"Para ser considerado um sólido de Platão, o poliedro precisa satisfazer 3 requisitos:
1) ser convexo;
2) todas as faces possuírem a mesma quantidade de arestas;
3) todos os vértices serem extremidades de uma mesma quantidade de arestas."

- **Figura1.2: Sólidos de Platão os Polígonos Regulares.**

Tetraedro: Associado ao fogo
Hexaedro: Associado à terra
Octaedro: Associado ao ar
Icosaedro: Associado à água
Dodecaedro: Associado ao universo ou cosmos

- **Figura1.3: Sólidos de Platão relacionados aos Elementos.**

- **Relação de Euler**: V + F = A+ 2

- Desenvolvida por Euler relaciona o número de vértices (V), o número de faces (F) e o número de arestas (A) .

1) Subdivisões da Cristalografia:

Cristalografia: é o estudo da forma externa e do arranjo atômico interno dos sólidos cristalinos e os princípios que governam seu crescimento.

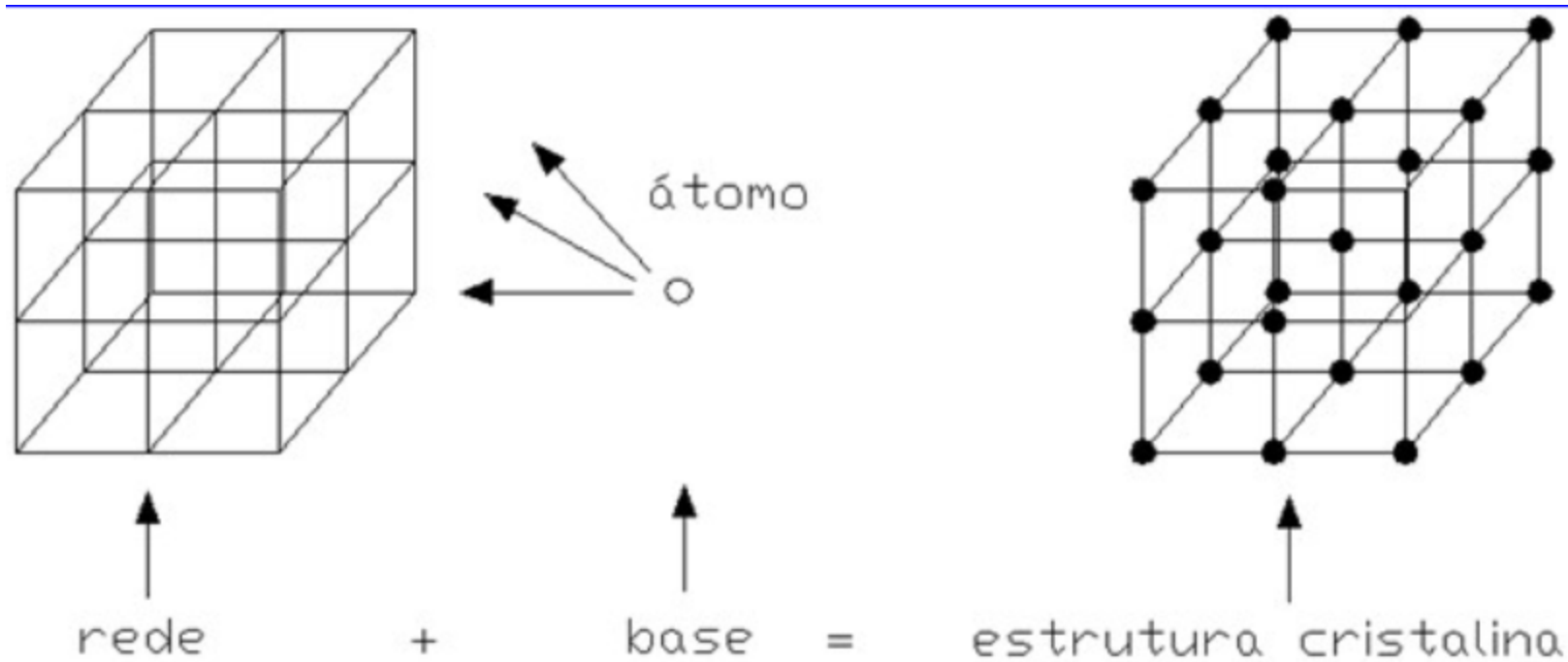
Subdivisões

_CRISTALOFÍSICA: As propriedades físicas dos cristais dentre as quais se destacam:

- **Cristalografia morfológica**: estuda a forma exterior do cristal.
- **Cristalografia estrutural**: se ocupa da estrutura interna dos cristais
- **Cristalografia Ótica**: análise dos cristais sob efeito da luz.
- **Radiocristalografia**: análise dos cristais pela aplicação dos Raios X.

_CRISTALOQUÍMICA: A natureza dos átomos que compõem o cristal, suas ligações, sua correlação com a estrutura cristalina e com as propriedades do cristal.

Cristalofísica: dureza, clivagem, tenacidade etc.
Cristalografia morfológica: Eixos de Rotação, simetria externa etc.
Cristalografia Optica: Indicatrizes Uniaxiais, Biaxiais, Isotrópicas etc.
Radiocristalografia: Lei de Bragg, Raio X...
Cristaloquímica: Números de Coordenação, Regras de Linus Pauling etc.

1.1) Conceitos de Cristalografia:

- Substância cristalina: átomos estão dispostos em posições regulares no espaço.
- Descrição: rede + base
  - Rede = estrutura geométrica
  - Base = distribuição dos átomos em cada ponto da rede.

1) Elementos e Operações de Simetria

Os elementos de simetria de um cristal são 4:

- **Planos de simetria** (representado pela letra **m** do ingles ''mirror'')
- **Eixos de rotação** (representado por formas/polígonos como quadrado = giro de 90°)
- **Centro de inversão** (representado pela letra **i** provavelmente por convenções ou pela própria palavra ''inversão'' ou mesmo ambas as opções)
- Eixo de **Rotoinversão** ou Eixo de **Rotação Imprópria** (Possui simetria realizando uma rotação seguida de uma inversão)

- A seguir serão detalhados com maior profundidade cada um dos elementos de simetria e suas **operações de simetria(isto é rotação, reflexão, inversão e rotoinversão**.)

- **Planos de Simetria(m)**: utilizados para separar dois objetos em pares enantiomeros isto é, espelhados. Observe a Figura 1.4 onde duas mãos ou motivos são espelhadas por um plano de simetria. "**Motivo**" para um leigo no assunto poderia achar possuir alguma relação com uma explicação ou algo do tipo... Na realidade aqui utilizamos como um conceito matemático em que um motivo pode ser qualquer coisa desde mãos, pontos, nós, vírgulas etc. O nome de sua operação de simetria é denominado de reflexão.

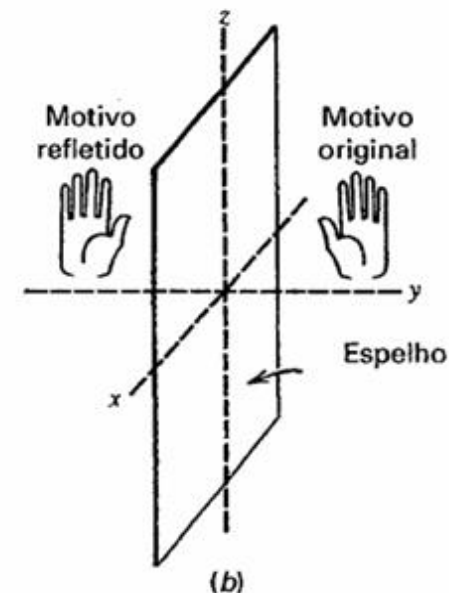
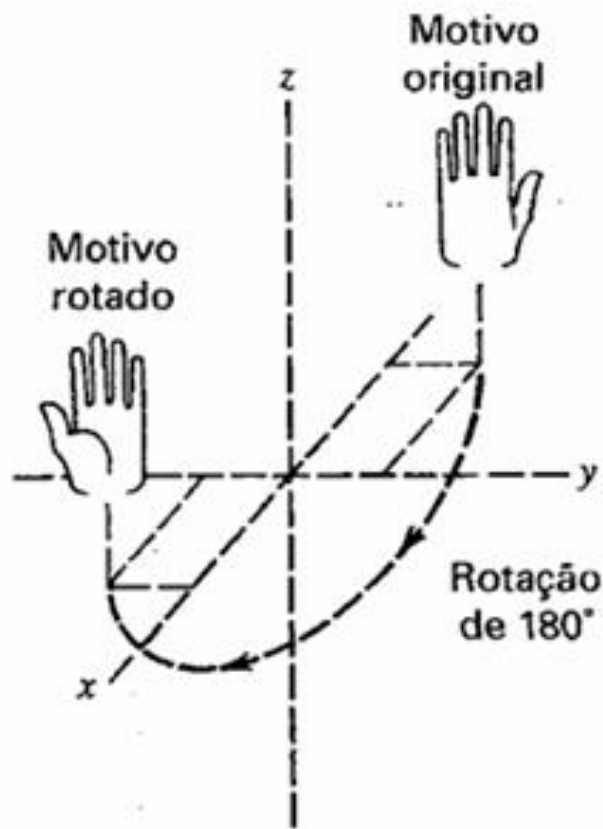



Figura 1.4 Motivos espelhados por um plano de simetria perpendicular a y

- **Eixos de Rotação**: aqui podemos definir eixos de simetria ou seja em quantos graus podemos rotacionar um cristal ou qualquer objeto para que ele repita sua estrutura simétrica. Isto é Realizar a operação de rotação.
- Na cristalografia temos diversos eixos de rotação:
- O **monário** (360/1 ou seja ele tem que rotacionar em 360 graus para voltar ao ponto original)
- O **binário** (360/2 ou seja ele tem que rotacionar em 180 graus para repetir sua simetria)
- O **ternário** (360/3 ou seja ele tem que rotacionar em 120 graus para repetir sua simetria)
- O **quaternário** (360/4 ou seja ele tem que rotacionar em 90 graus para repetir sua simetria)
- E por último o **Senário** (360/6 ou seja ele tem que rotacionar em 60 graus para repetir sua simetria)
- O eixo **quinário** na Cristalografia (isto é... rotação em 72 graus) é inexistente devido ao fato de sobrarem espaços vazios entre seus padrões de repetição. No entanto, eles serão discutidos com mais detalhes em breve.

- Figura 1.5: Rotação de um motivo em 180 (portanto utilização de um eixo binário)

Importante comentar que as rotações de cristais, motivos, objetos etc. São feitas sempre por convenção apenas no sentido anti-horário. Segue na figura 1.5 os símbolos que representam cada eixo de rotação com exceção dos de **rotoinversão** (rotação + inversão) que posteriormente serão discutidas.

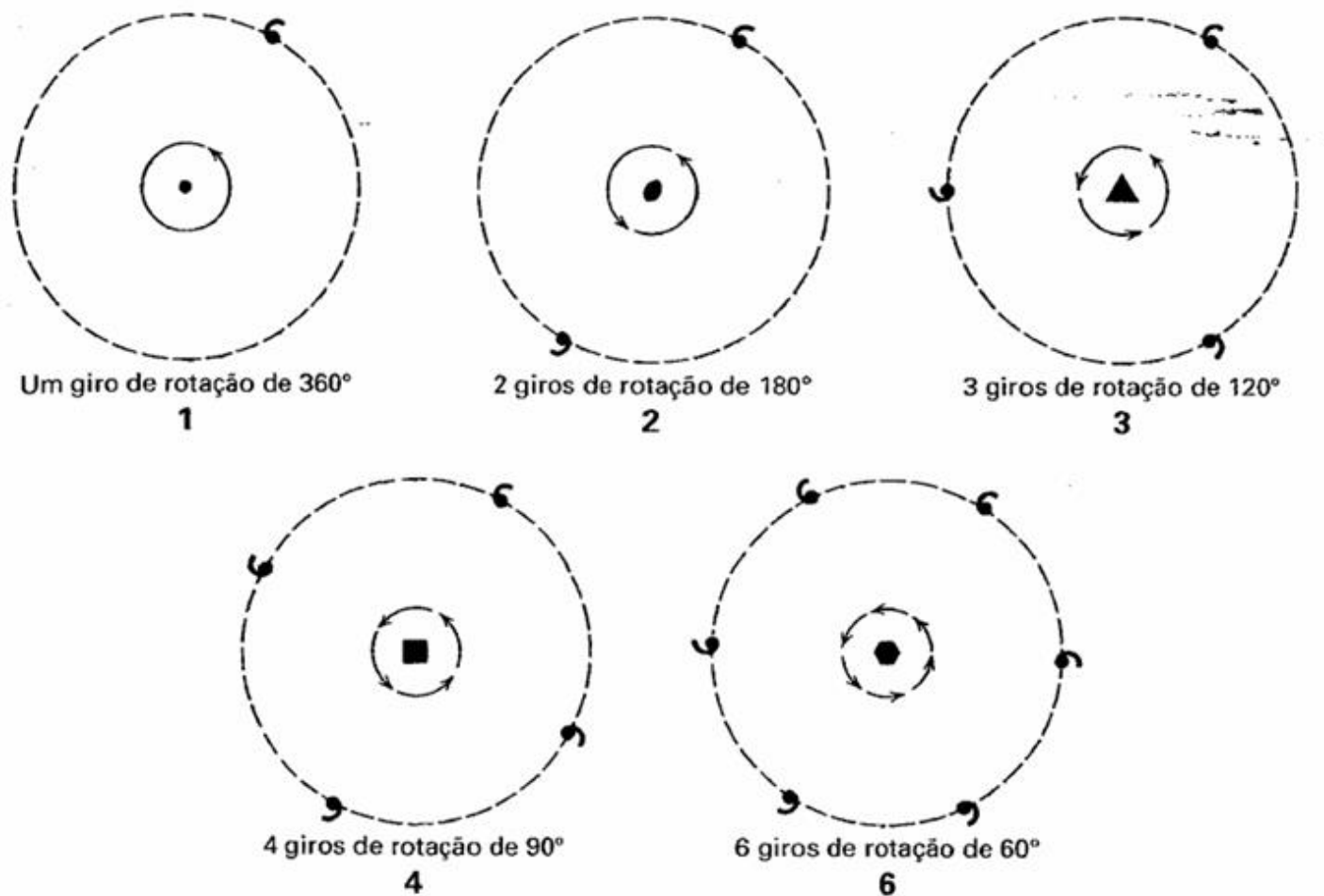



Figura 1.3: Eixos de rotação e como representá-los
(Monário = ponto)
(Binário = similar ao formato de um olho)
(Ternário= triangulo)
(Quaternário=quadrado)
(Senário=Hexágono)

Os eixos podem ainda ser Representados por A1, A2, A3, A4 e A6 ou E1, E2, E3, E4 e E6 (Sendo o ''A'' axis do ingles ou seja ''eixo'')

- **Centro de Simetria**(i): Centro de simetria é o ponto de simetria que coincide com o centro geométrico do cristal quando simplesmente pegamos qualquer ponto de um cristal seguimos pelo centro encontrando do outro lado do cristal uma simetria equivalente. Observe a Figura 1.8 onde o motivo é invertido ao passar pelo centro de simetria. E a figura 1.6 e 1.7 Sendo todas evidenciadas pela operação de Inversão.

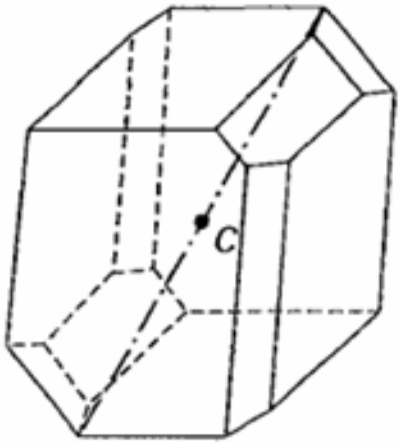



Figura 1.6: Faces equivalentes de um cristal ao passar pelo Centro de Simetria (C)

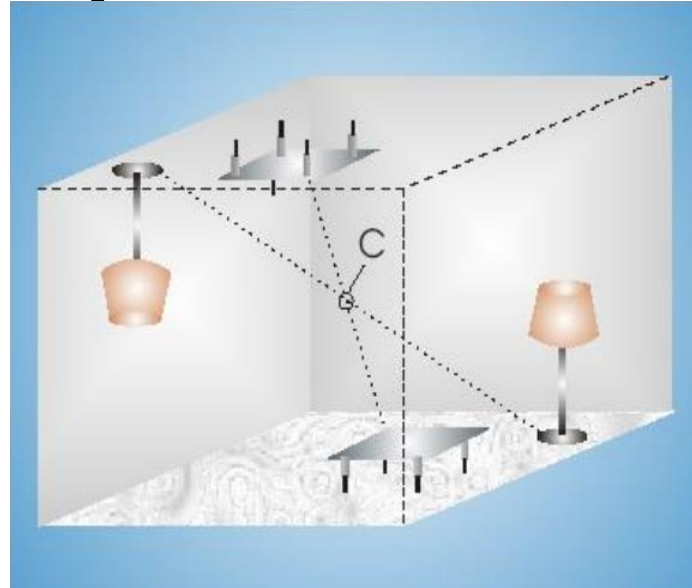



Figura 1.7: Abajur e mesa sendo invertidos pelo centro de simetria (C)

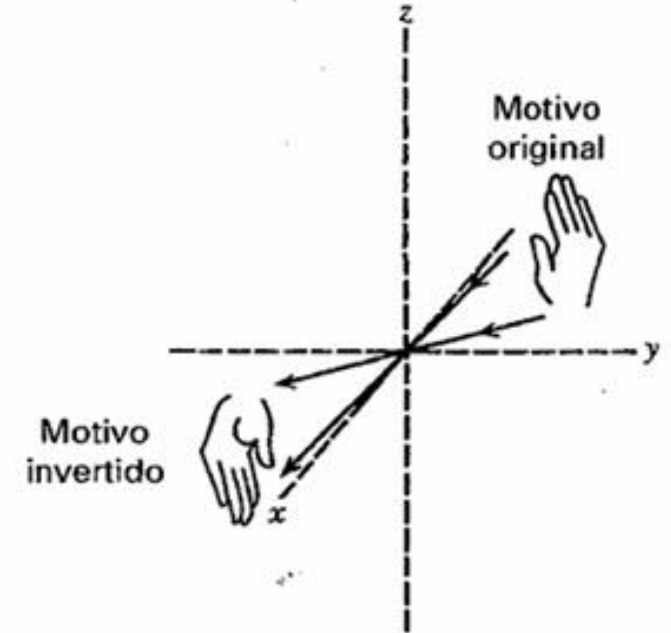



Figura 1.8: Motivo invertido pelo centro de simetria localizado na origem.

- **Rotoinversão** ou **Rotação Imprópria**: Aqui o cristal é primeiramente rotacionado no sentido anti-horário x graus e em seguida é invertido pelo centro de simetria. Observe com atenção a Figura 1.9 onde inicialmente o motivo do canto superior direito é rotacionado e invertido gerando o motivo do canto inferior direito. Evidenciando a operação de Rotoinversão.

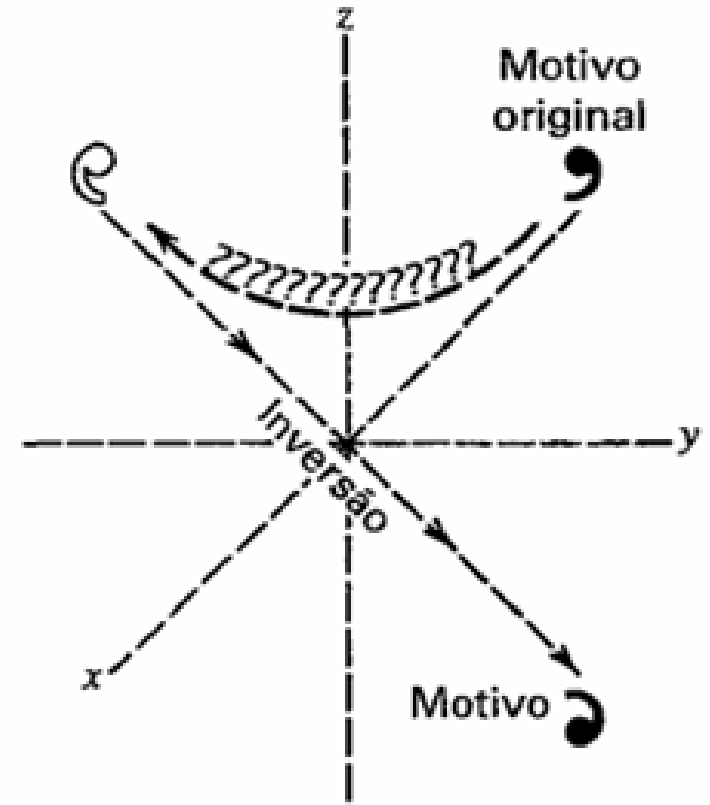



Figura 1.9: Rotação Imprópria de um Motivo.

- As rotações impróprias também possuem seus símbolos de representação assim como os eixos de rotação que não passam por centro de simetria. Observe a Figura 2 onde são representados na parte superior os eixos de rotação e mais abaixo os eixos de rotação imprópria. Perceba que os eixos de rotoinversão são representados com uma barra em cima (se le "1 barra"). Note também que o eixo impróprio monário é equivalente por uma passagem a um centro de simetria (i) assim como o eixo impróprio binário é equivalente a um plano de simetria (m) .

Símbolos escritos	Símbolos gráficos
1	Nenhum
2	⬮
3	▲
4	◆
5	⬟
6	⬢
m	—
$\bar{1}$ (=centro)	*Ver legenda
$\bar{2}$ (= m)	*Ver legenda
$\bar{3}$ (=3 mais um centro)	△
$\bar{4}$	◈
$\bar{6}$ (=3/m)	⬢

Figura 2

Figura 2.1: Elementos de Simetria: Eixo, Plano, Centro e Eixo impróprio respectivamente.

• 2) Notações de Simetria e Grupos Pontuais:

Na Cristalografia temos Notações que nos permitem descrever cristais dos mais variados tipos, classes, sistemas. Observe a Tabela abaixo:

TABELA 6.1 Nomenclatura da simetria por ponto

Elemento de simetria	Operação de simetria	Símbolo de simetria	Notação de Hermann-Mauguin
Eixo de rotação*	Rotação	A_1, A_2, A_3, A_4, A_6	1, 2, 3, 4, 6
Plano especular**	Reflexão	m	m
Centro de simetria	Inversão	i	$\bar{1}$
Rotoinversão	Rotação + inversão	$\bar{A}_1 = i, \bar{A}_2, \bar{A}_3, \bar{A}_4, \bar{A}_6$	$\bar{1}$, m $(=\bar{2})$, $\bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$

* N. de R. T.: Também designado como "eixo giro". (BORGES, F.S. *Elementos de cristalografia*. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 1980.)

** N. de R. T.: Também chamado simplesmente de "espelho". (BORGES, F.S. *Elementos de cristalografia*. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 1980.)

- Observe a tabela ao lado e perceba os 32 grupos pontuais e os seus conteúdos de simetria com todas as notações específicas para cada sistema cristalino.

TABELA 6.3 Os 32 grupos pontuais (classes de cristais) e seus conteúdos de simetria (os que estão em negrito são apresentados em detalhe no Capítulo 9)

Sistema cristalino	Classe cristalina	Conteúdo de simetria
Triclínico	1	nenhum
	$\bar{1}$	
Monoclínico	2	$1A_2$
	m	$1m$
	2/m	i, $1A_2$, $1m$
Ortorrômbico	222	$3A_2$
	mm2	$1A_2$, $2m$
	2/m2/m2/m	i, $3A_2$, $3m$
Tetragonal	4	$1A_4$
	$\bar{4}$	$1\bar{A}_4$
	4/m	i, $1A_4$, m
	422	$1A_4$, $4A_2$
	$4mm$	$1A_4$, $4m$
	$\bar{4}2m$	$1\bar{A}_4$, $2A_2$, $2m$
	4/m2/m2/m	i, $1A_4$, $4A_2$, $5m$
Hexagonal*	3	$1A_3$
	$\bar{3}$	$1\bar{A}_3 (= i + 1A_3)$
	32	$1A_3$, $3A_2$
	3m	$1A_3$, $3m$
	$\bar{3}2/m$	$1\bar{A}_3$, $3A_2$, $3m$ $(1\bar{A}_3 = i + 1A_3)$
	6	$1A_6$
	$\bar{6}$	$1\bar{A}_6 (= 1A_3 + m)$
	6/m	i, $1A_5$, $1m$
	622	$1A_6$, $6A_2$
	6mm	$1A_6$, $1m$
	$\bar{6}m2$	$1\bar{A}_6$, $3A_2$, $3m$ $(1\bar{A}_6 = 1A_3 + m)$
	6/m2/m2/m	i, $1A_6$, $6A_2$, $7m$
	23	$3A_2$, $4A_3$
	$2/m\bar{3}$	$3A_2$, $3m$, $4\bar{A}_3$ $(1\bar{A}_3 = 1A_3 + i)$
	432	$3A_4$, $4A_3$, $6A_2$
	$\bar{4}3m$	$3\bar{A}_4$ $4A_3$, $6m$
	$4/m\bar{3}2/m$	$3A_4$, $4\bar{A}_3$, $6A_2$, $9m$ $(1\bar{A}_3 = 1A_3 + i)$

* Nesta tabela, todos os grupos pontuais começando com 6, $\bar{6}$, 3 e $\bar{3}$ estão agrupados no sistema hexagonal. Em edições anteriores do *Manual de Mineralogia*, o sistema hexagonal era desmembrado nas divisões hexagonal e romboédrica. O uso dessas duas subdivisões, baseadas na presença de eixos de 6 ou $\bar{6}$ *versus* a presença de eixos 3 ou $\bar{3}$ na simetria morfológica de um cristal, causa confusão quando investigações subsequentes por raio X mostram cristais específicos onde, por exemplo, a simetria 32 é baseada numa rede hexagonal. É o caso do quartzo de baixa temperatura, que exibe simetria morfológica 32, mas é baseado numa rede hexagonal primitiva, resultando no grupo espacial $P3_12$ (ou $P3_22$).

3) **Sistemas Cristalinos e parâmetros de cela**: Ao lado temos todos os sistemas cristalinos e os seus respectivos eixos **a, b** e **c**

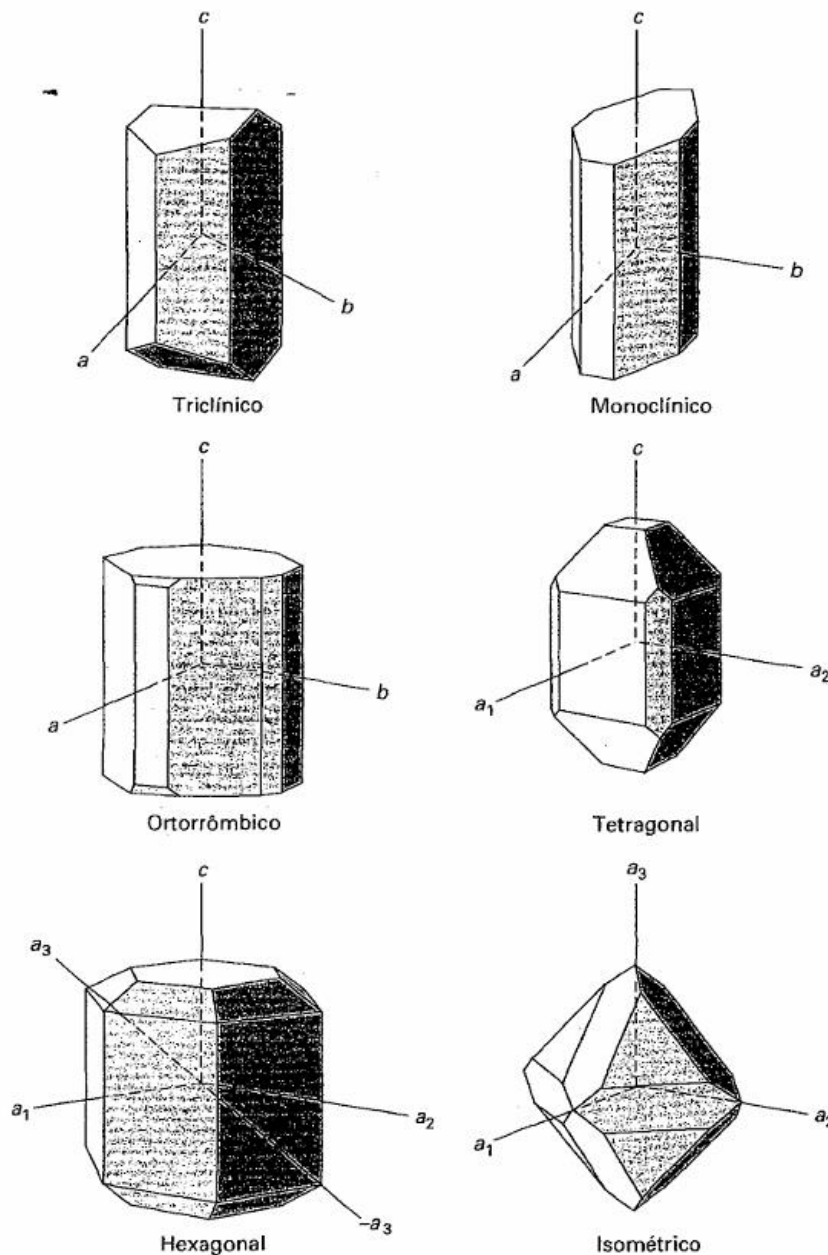



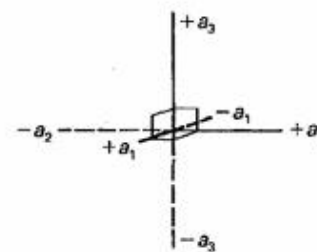
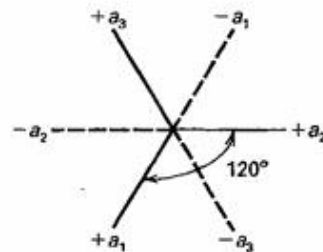
FIGURA 6.26 Representação gráfica da relação entre a morfologia dos cristais e a escolha dos eixos cristalográficos. Estes desenhos em perspectiva fornecem somente uma visualização qualitativa. Na Fig. 6.25 são fornecidos os comprimentos relativos dos eixos e ângulos entre eles.

FIGURA 6.25 Ilustrações dos eixos cristalográficos em cada um dos seis sistemas cristalinos. As três direções são denominadas *a*, *b* e *c*, a não ser que a simetria torne-as equivalentes. A vertical é denominada de *c*, exceto no sistema isométrico, no qual todos os eixos são iguais. Os dois eixos horizontais são denominados de *a* e *b*. Se forem iguais, receberão a mesma letra, como a_1 e a_2. No sistema hexagonal, há três eixos horizontais iguais denominados de a_1, a_2 e a_3. Ver na Tabela 6.5 a relação entre a notação de simetria (como no sistema de Hermann-Mauguin) e os eixos cristalográficos.

* O símbolo ≠ implica em desigualdade por causa de simetria; igualdade acidental pode ocorrer.

Tetragonal

$a_1 = a_2 = a_3$, interceptando-se a 120°.
c é perpendicular ao plano com a_1, a_2, a_3

Hexagonal

$a_1 = a_2 = a_3$
todos os eixos a 90° entre si

Isométrico

Diferentes sistemas cristalinos observados a partir do hábito cristalino

anatásio (sistema tetragonal)

diamante (sistema cúbico)

espinélio = (sistema cúbico) = diamante

coríndon (sistema trigonal)

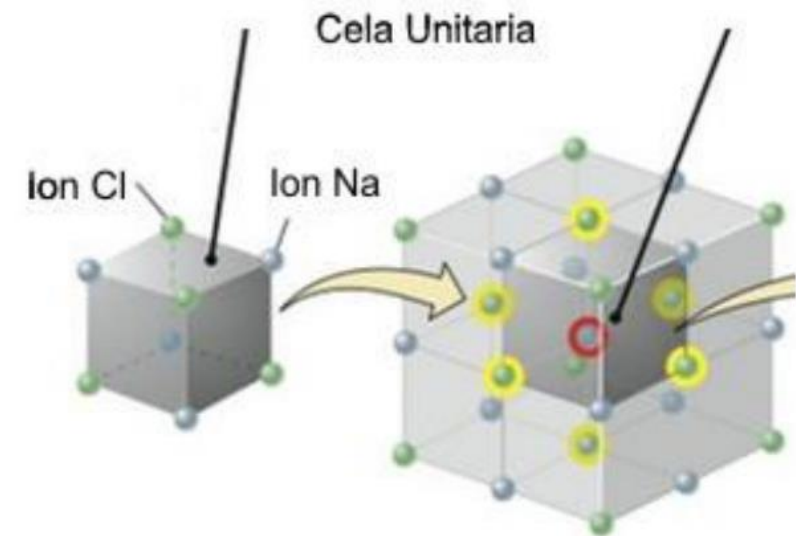
berilo (sistema hexagonal)

- Figura 2.2: Topázio (Monoclínico)

- Figura 2.3: Cianita (Triclínico)

- Os **parâmetros de cela** podem ser definidos pelos eixos cristalográficos **a**, **b** e **c**. ou variantes como a1, a2, a3 etc. E os angulos formados entre os eixos cristalográficos **α**, **β** e **γ** (alfa, beta e gama respectivamente).

- Temos também o conceito de **cela unitária** dito por muitos erroneamente como célula unitária...
- Uma cela unitária é de forma simples o menor componente de um cristal que se repetido n vezes no espaço vem a formar o cristal como um todo.

Figura1: Cela Unitária Cúbica da Halita (NaCl)

4) **Redes de Bravais:**

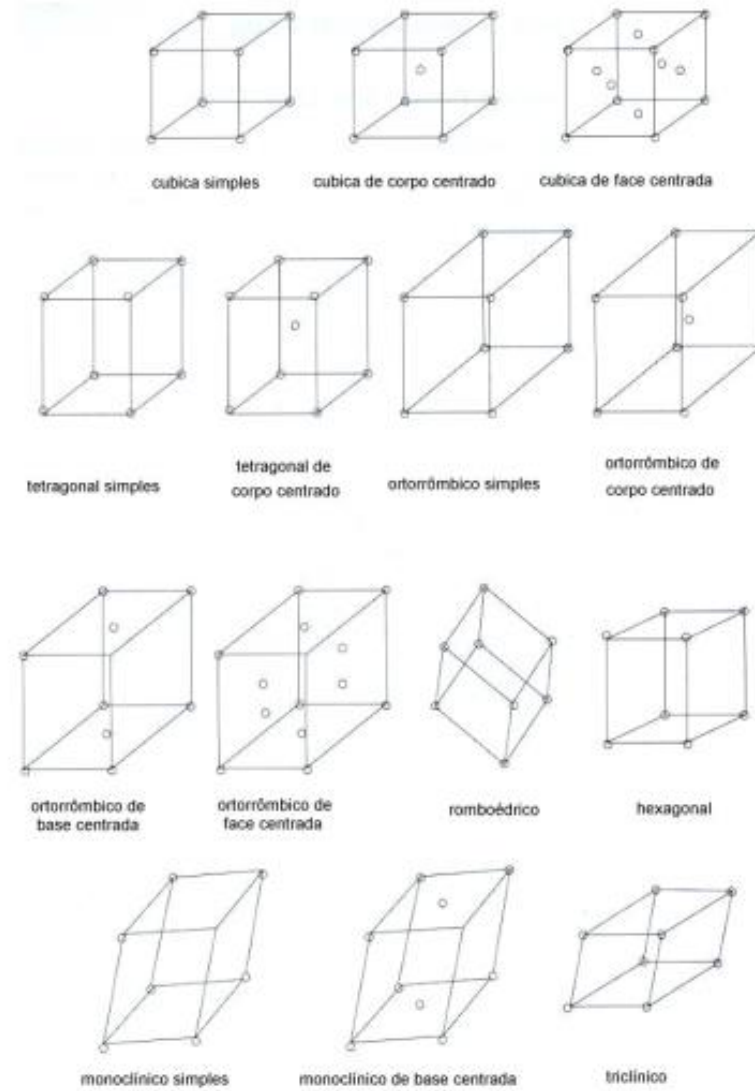
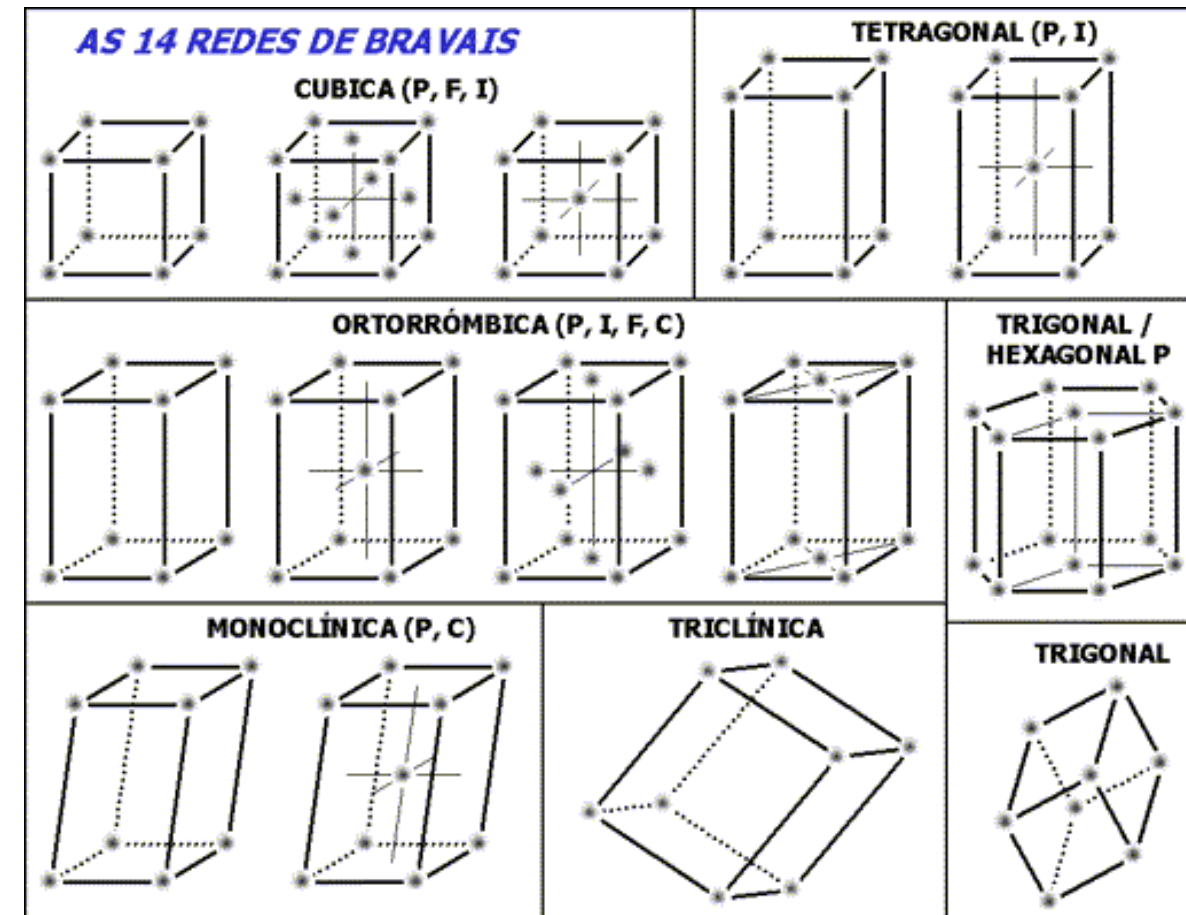



FIGURA 1.1: Grupos cristalinos gerados pelas operações de simetria, redes Bravais[1].

- Perceba que temos diferentes tipos de cela unitária. Dentre elas o tipo S**imples** ou P**rimitivo** (representado pela letra **P) . Corpo centrado (representado pela letra I que vem do alemão** "Innenzentriert"**) . Face Centrada (representado pela letra F) e de Base Centrada... a primitiva é representada por àtomos, íons ou moléculas apenas nos vértices do cristal, no tipo face centrada temos um átomo em cada face do cristal além das presentes nos vértices. Na de base centrada temos dois átomos um em cada base do cristal.**

- Figura 2.4: **Redes de Bravais.** Perceba que dentro do Sistema Hexagonal temos o Trigonal ou conhecido como Romboédrico ou ainda **Hexagonal R** pela escola americana já a escola europeia considera o trigonal um sistema a parte.

5) Formas Cristalinas:

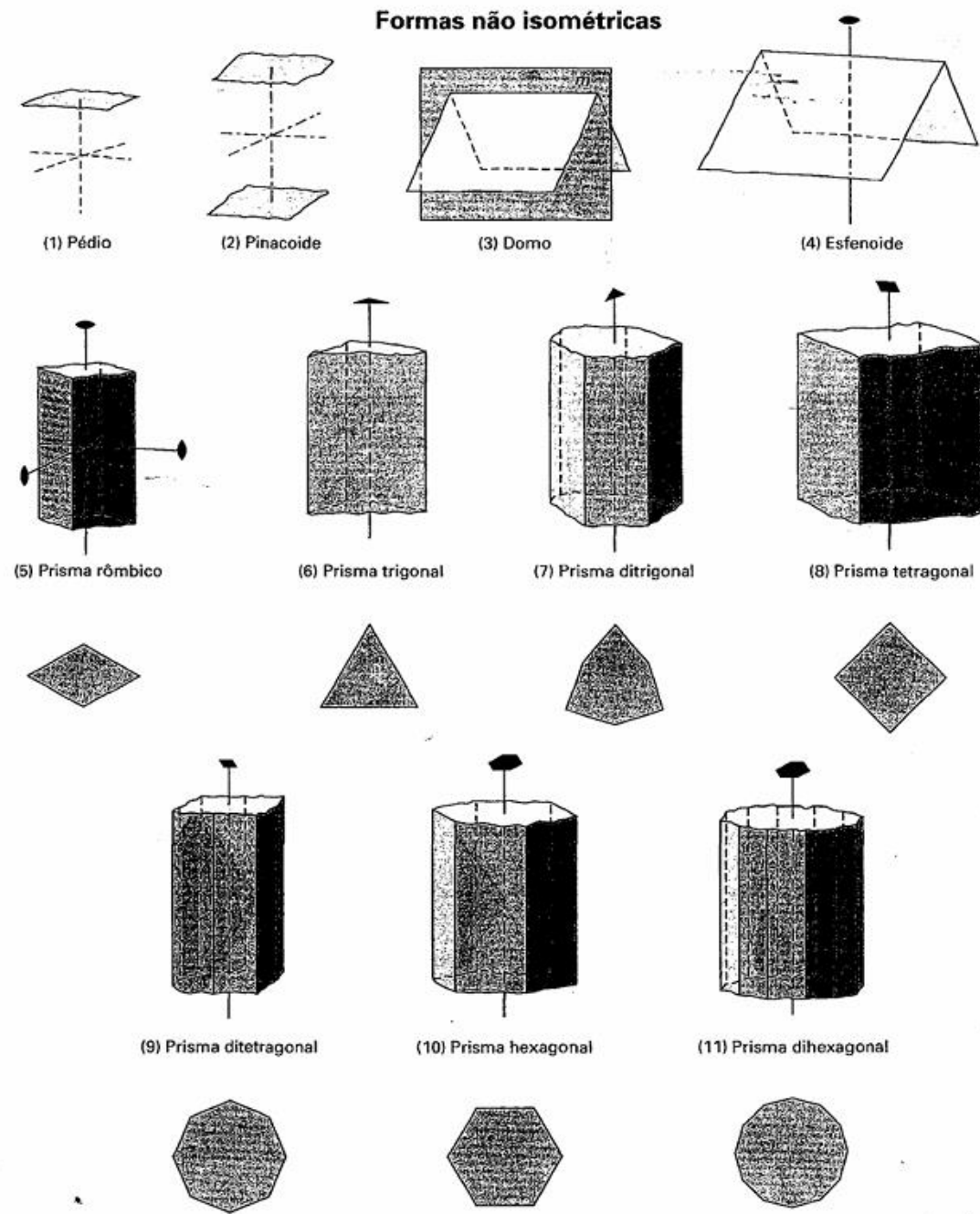
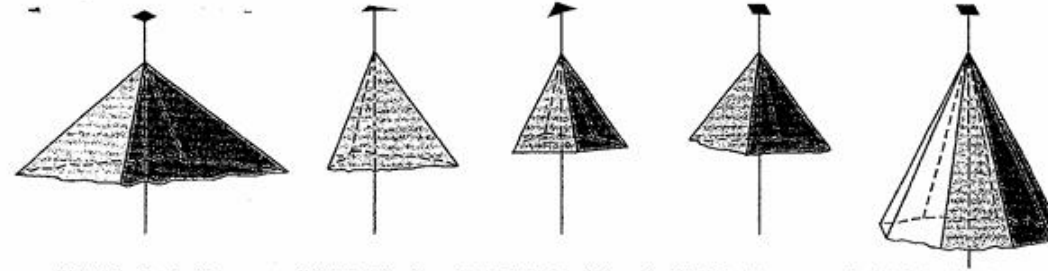
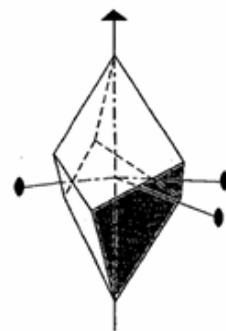
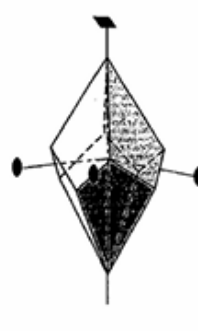
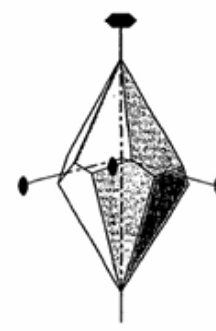
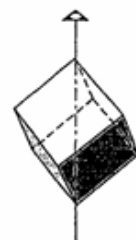
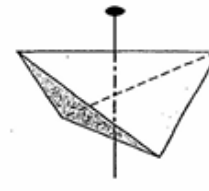
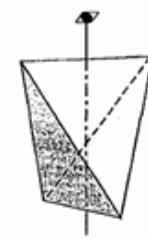
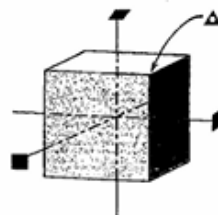
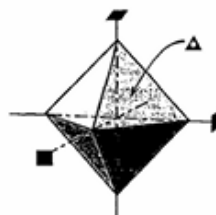
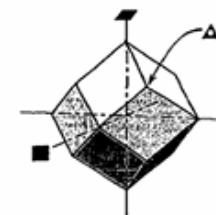
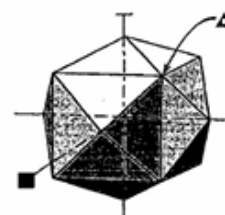
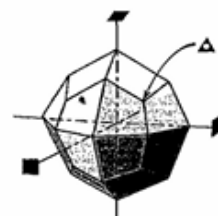
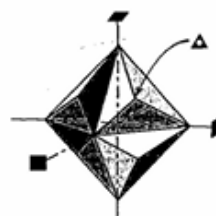
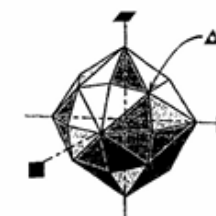
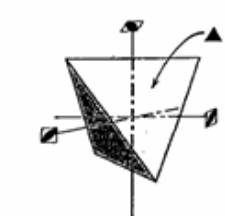



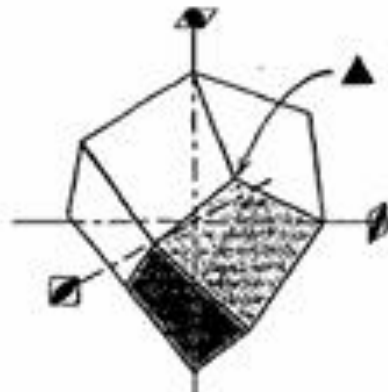
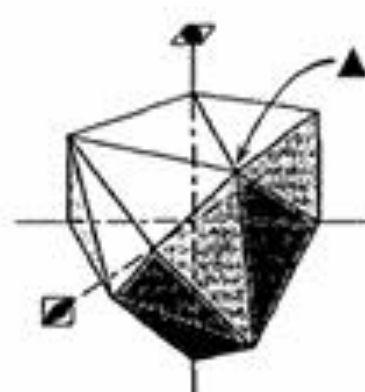
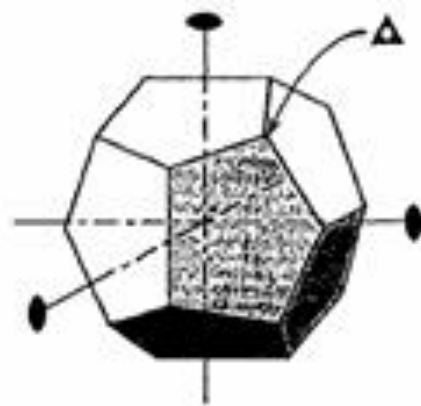
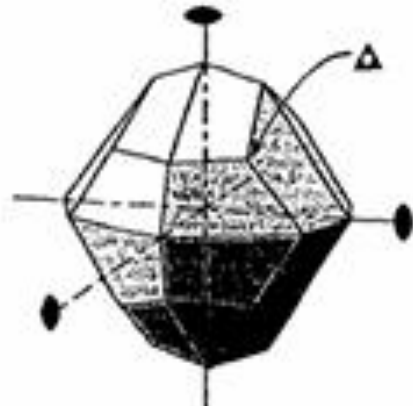
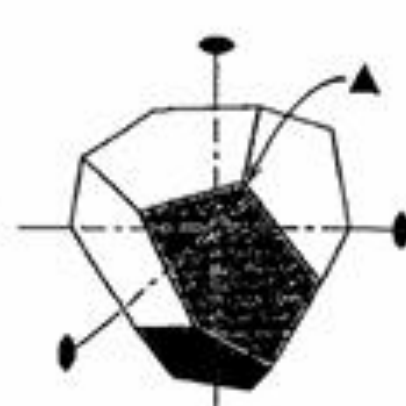
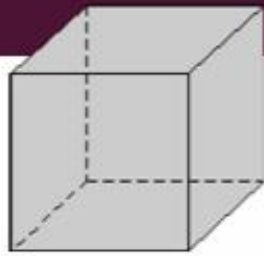
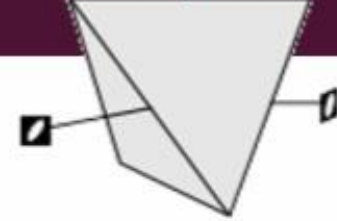
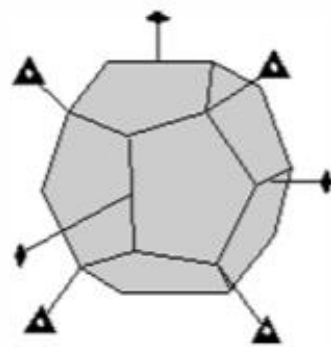
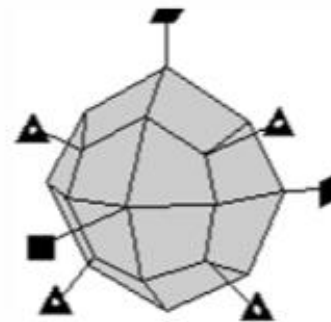
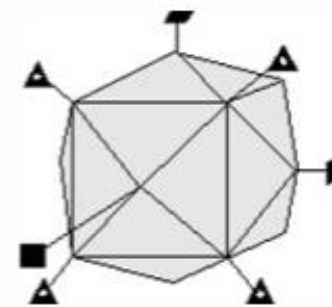
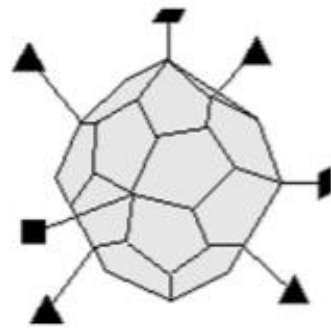
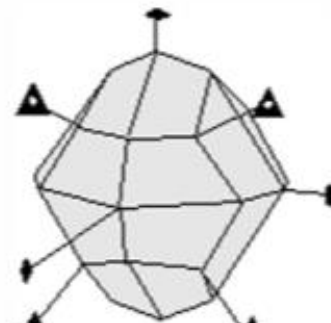
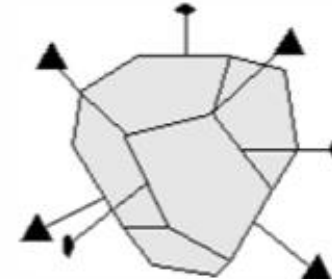
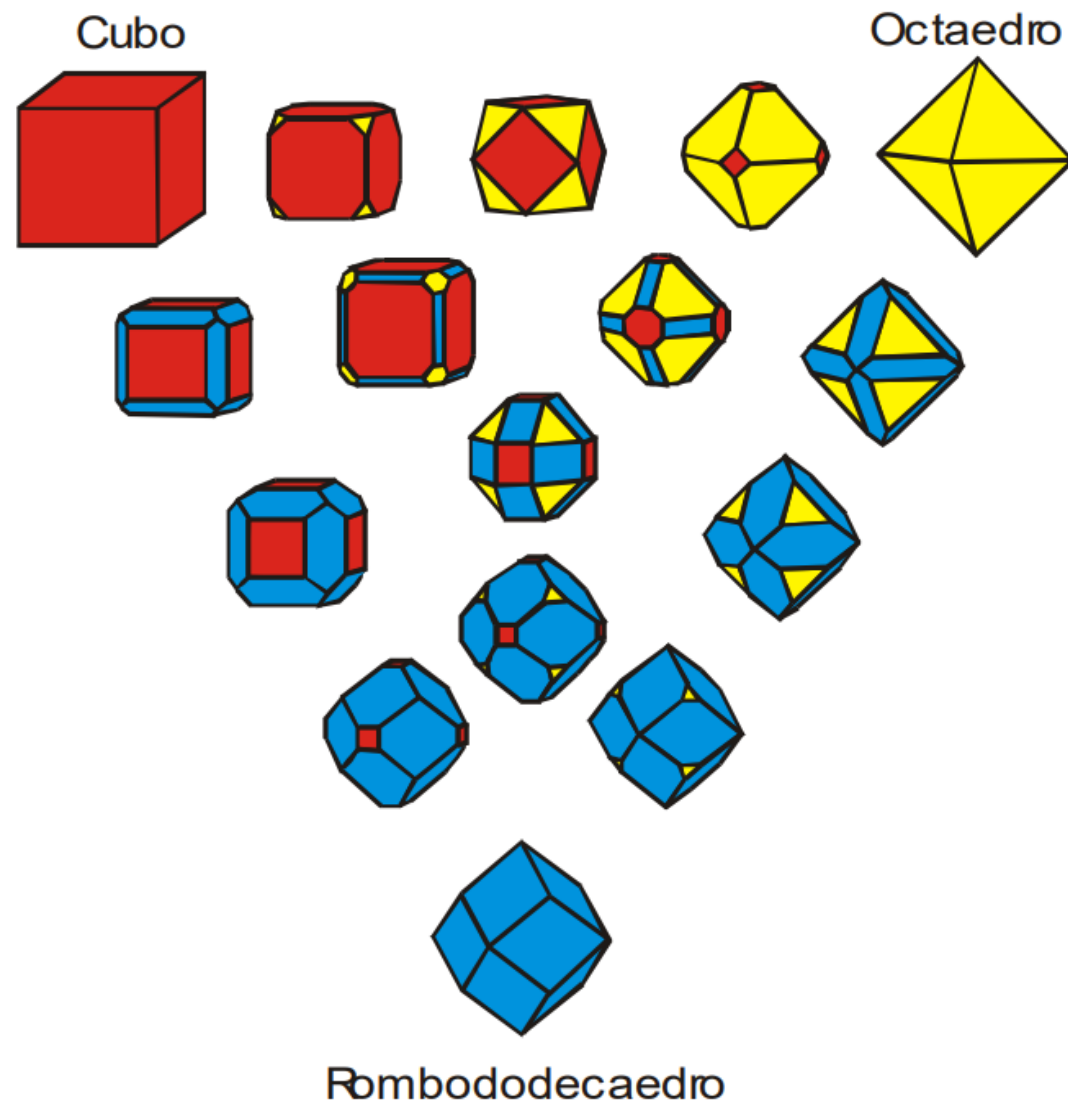
FIGURA 6.36 As 48 diferentes formas de cristais e alguns dos seus elementos de simetria.

Formas não isométricas (continuação)

(12) Pirâmide rômbica (13) Pirâmide trigonal (14) Pirâmide ditrigonal (15) Pirâmide tetragonal (16) Pirâmide ditetragonal

(17) Pirâmide hexagonal (18) Pirâmide dihexagonal (19) Bipirâmide rômbica (20) Bipirâmide trigonal (21) Bipirâmide ditrigonal

(22) Bipirâmide tetragonal (23) Bipirâmide ditetragonal (24) Bipirâmide hexagonal (25) Bipirâmide dihexagonal

(continuação da Fig. 6.36)

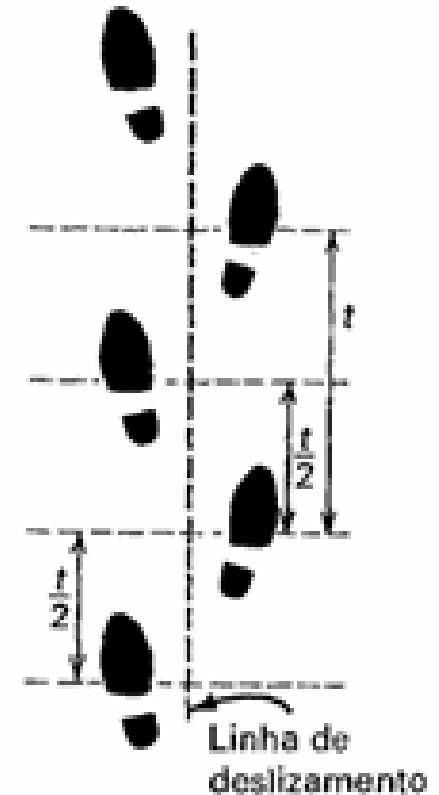
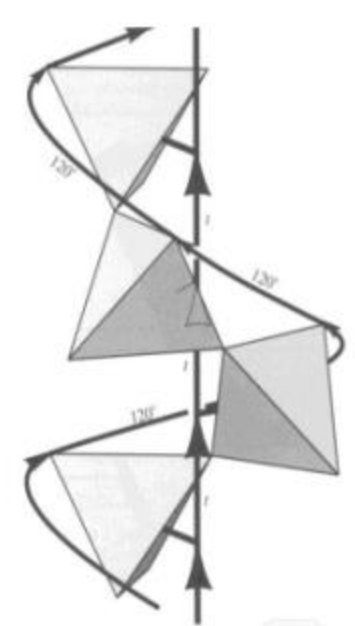
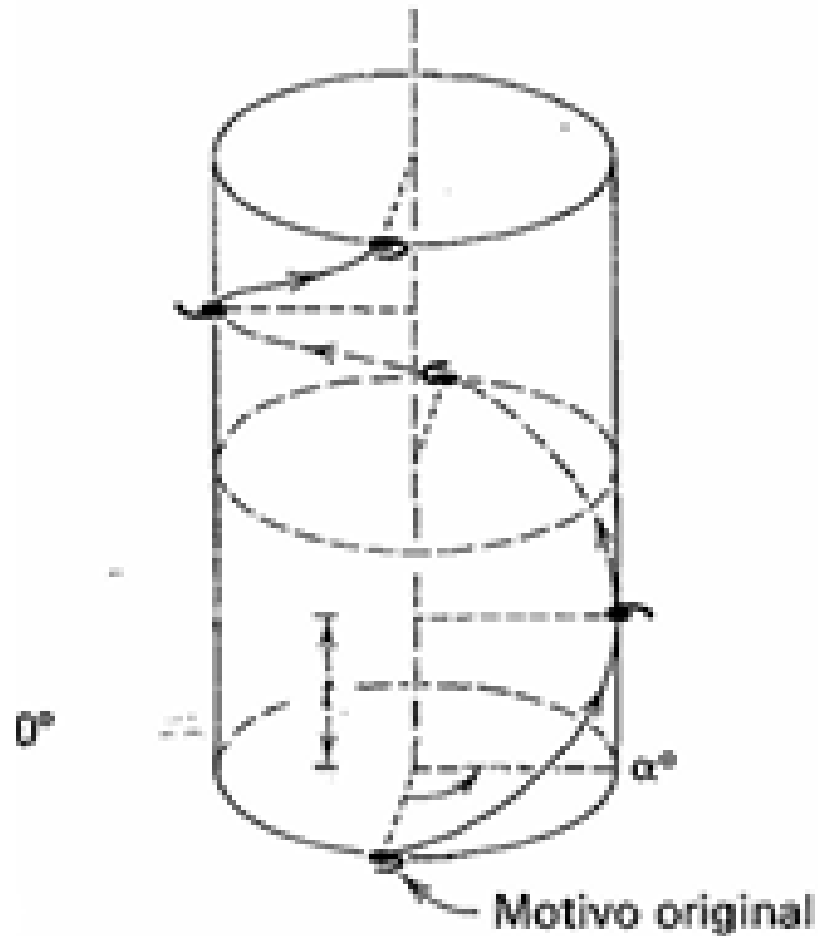
(continuação da Fig. 6.36)

Formas isométricas (continuação)

(42) Tristetraedro (43) Dodecaedro deltoide (44) Hextetraedro (45) Giroide

(46) Piritoedro (47) Diploide (48) Tetartoide *(continuação da Fig. 6.36)*

CUBO
OCTAEDRO
ROMBODODECAEDRO
TETRAEDRO
PENTADODECAEDRO
TRAPEZOEDRO
TETRAEXAEDRO

- Figura 2.5: Combinações de Formas

- Observações: Algumas formas podem ser encontradas com outros nomes como o Giroide (Giroedro) ou o Tetartoide (Tetartoedro), Diploide (Diploedro) etc.

- **Teste de fixação de cristalografia formas cristalinas**:

https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSeBzwRfbG3Fy53VOBVjCKt7ZpyTKby7BLFkWf5RBlkGHeO3Lw/viewform?usp=sf_link

- **Planos de deslizamento**: Simetria representada pela realização de uma translação **t** como observado na figura ao lado simbolizado por pegadas.

- **Eixos Helicoidais**: apresentam uma simetria caracterizada pela rotação helicoidal de um motivo. Como observado na figura ao lado. Também conhecidos como **Screw Axis**. Neste caso o motivo é rotado no sentido anti-horário mas poderia ser rotado no sentido horário também.

10) Eixos Quinários:

- Os eixos quinários não são permitidos nas estruturas dos cristais como já foi discutido de forma breve anteriormente. No entanto, no mundo biológico é bem presente a simetria quinárias como em quasicristais (quase-cristais) onde temos os eixos quinários presentes mas não temos uma estrutura repetitiva ao longo de toda a estrutura dele portanto, não sendo um cristal. Observe algumas imagens abaixo sobre a simetria quinária.

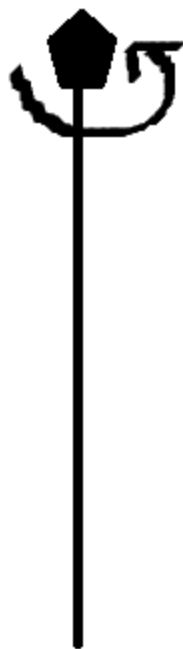



Figura 2.6: Possível representação simplificada de um **eixo quinário** simbolizado por um polígono de 5 arestas (pentágono). (rotação de 72 graus lembrando que as rotações são sempre realizada em sentido anti-horário)

Figura 2.7 : Melosa-roxa e simetria quinária (simetria repetida a cada 72 graus)

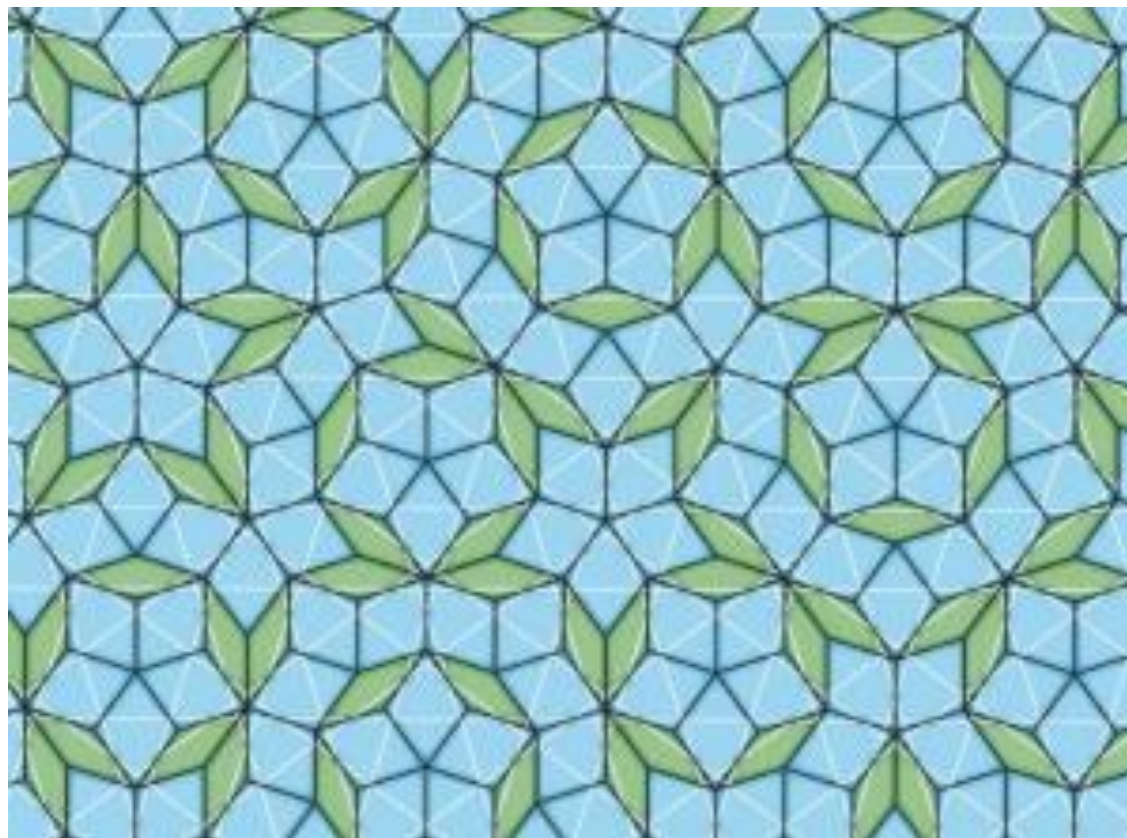
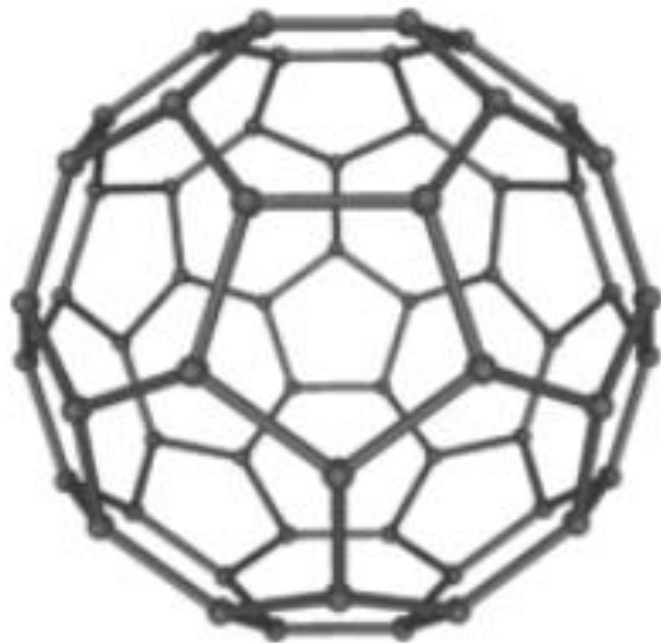
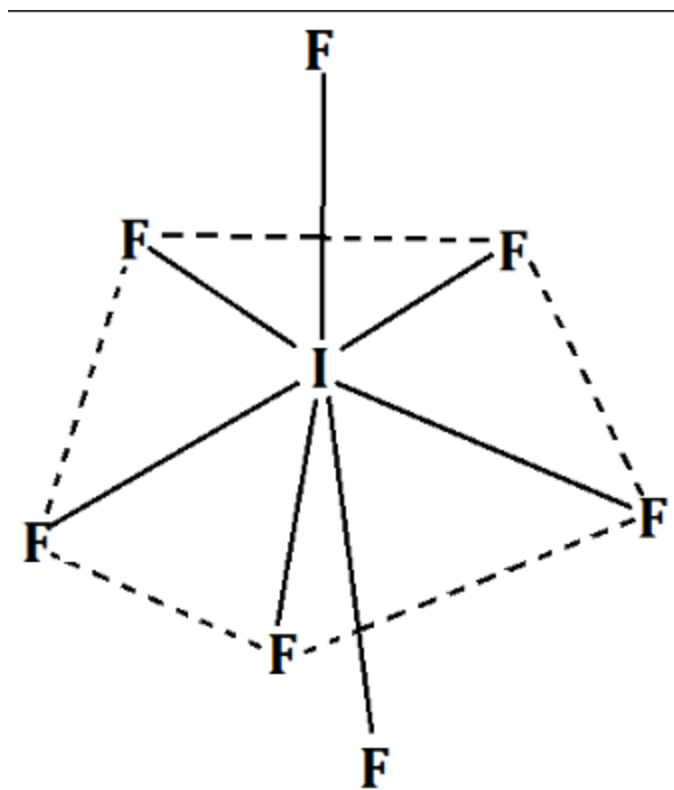



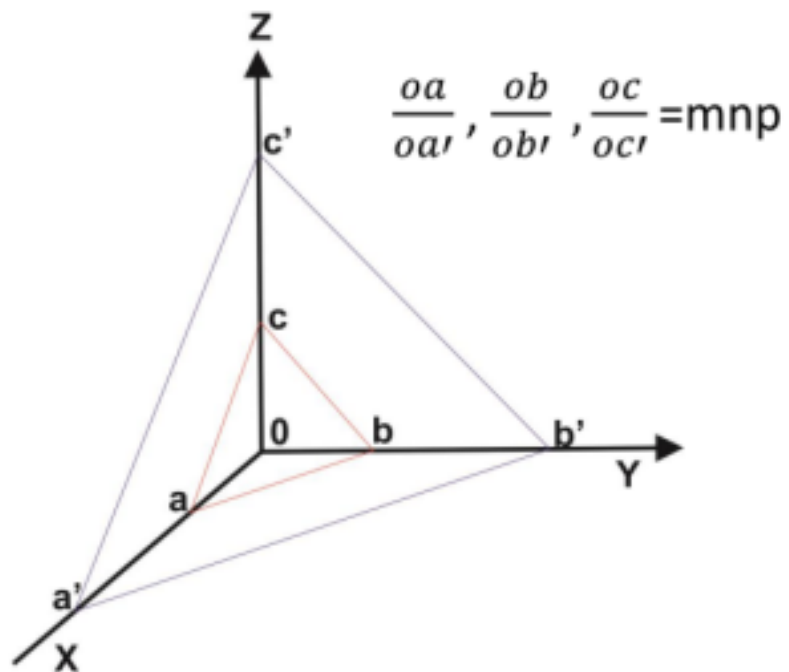
Figura 2.8: Quasicristais (Quase-cristais) materiais que seriam tidos como "impossíveis" até décadas atrás.

Fulereno, C_{60}

(organico)

(Heptafluoreto de iodo)

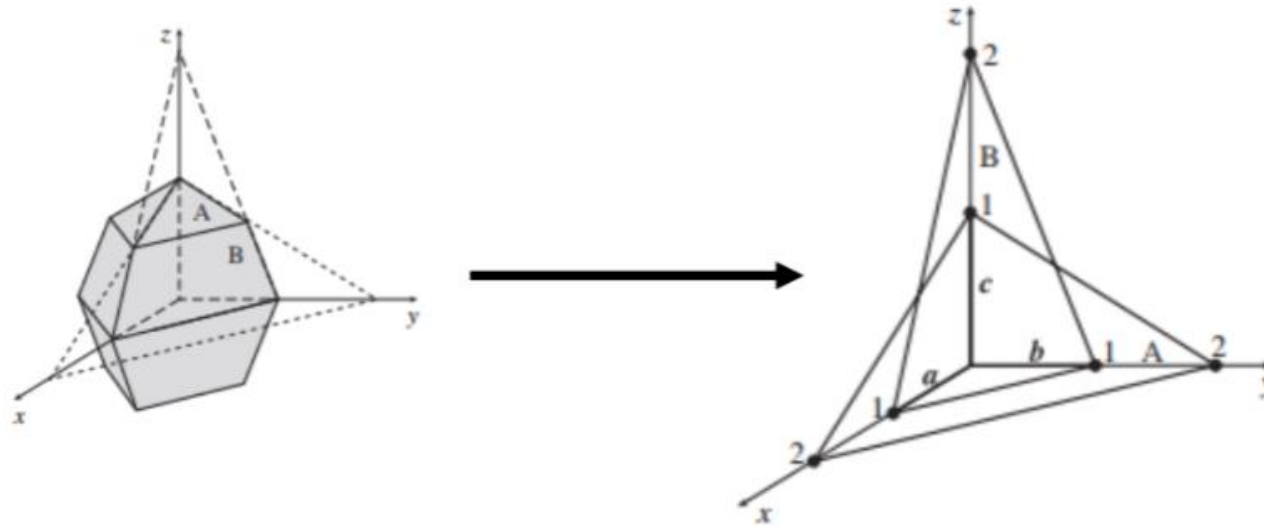
IF_7 (artificial)

2-Lei da racionalidade dos eixos-Lei de Haüy (1784)

A relação existente entre os segmentos determinados por duas ou mais faces não paralelas sobre as arestas de um cristal é simples e racional.

$$\frac{oa}{oa'}, \frac{ob}{ob'}, \frac{oc}{oc'} = mnp$$

Haüy(1743 –1822)

a, b e c são os comprimentos determinados pelas faces;
m, n e p são coeficientes de derivação que fornecem a posição da face no reticulo.

Parâmetros de Weiss (1819)

Os valores de intercessão das faces : m, n e p são chamados índices de Weiss e são usados para descrever a orientação do plano reticular em relação aos eixos x ,y e z

O índice de Weiss da face A é 2:2:1
O índice de Weiss da face B é 1:1:2

Indices de Miller: representam faces cristalinas por um conjunto de números inteiros (h,k,l). Exemplo (100) (010) (001) perceba que as faces interceptam os eixos cristalográficos a, b e c respectivamente. Vale lembrar que são utilizados sempre parênteses ou mesmo colchetes e que os números podem vir com uma barra em cima significando que é o negativo deste número deste modo se lê como (1 barra por exemplo...) Para encontrarmos os índices de miller basta inverter os números (i.e. 1/h , 1/k e 1/l) e fazer se necessário as devidas simplificações já que os índices de miller são sempre expressos por **números inteiros** n [isto é Z= números negativos positivos e o zero]{obs: não confundir com o Z de número atômico em química...} A seguir segue alguns exercícios de fixação para uma melhor aprendizagem.

1) Dado o ponto P(1,1,1) determine os índices de miller.

2) Dado o ponto P(2,1,3) determine os índices de miller.

3) Dado x=-1 y= ½ e z=1 determine os índices de miller para o plano que intercepta xyz nos pontos dados.

4) Dado x= 2/3 y=2 e z=-2/3 determine os índices de miller para o plano que intercepta xyz nos pontos dados.

5) Dado o cubo abaixo escreva as coordenadas dadas nas faces (100) (010) e (001)

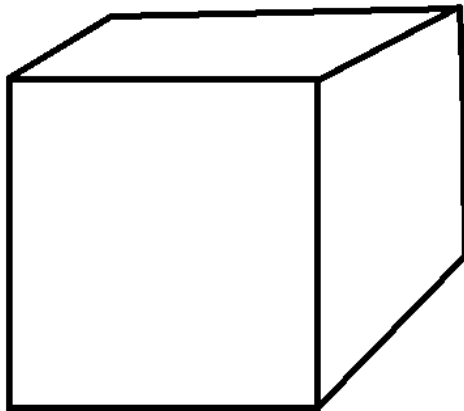
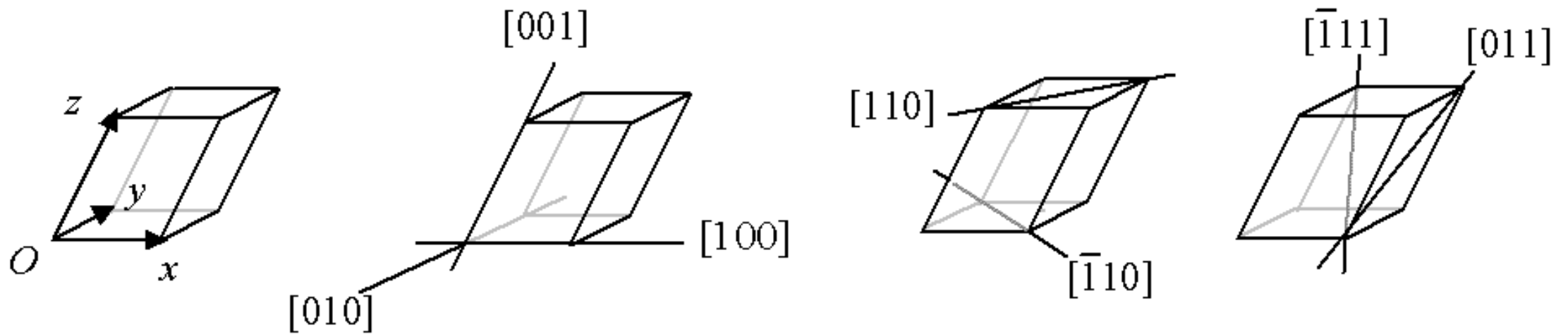



Figura 1: Perceba que a imagem apresenta a representação de direções e não de planos. Nesse caso utilizamos a notação entre colchetes exemplo [010] equivalente a notação $\langle hk\ell \rangle$ ao contrário da notação usada para planos (010) que é equivalente a notação de {010}

Figura 2: William Hallowes Miller mineralogista britanico que criou as bases da moderna cristalografia.

Figura 1.2: Representação dos índices de Miller em uma cela unitária cúbica.

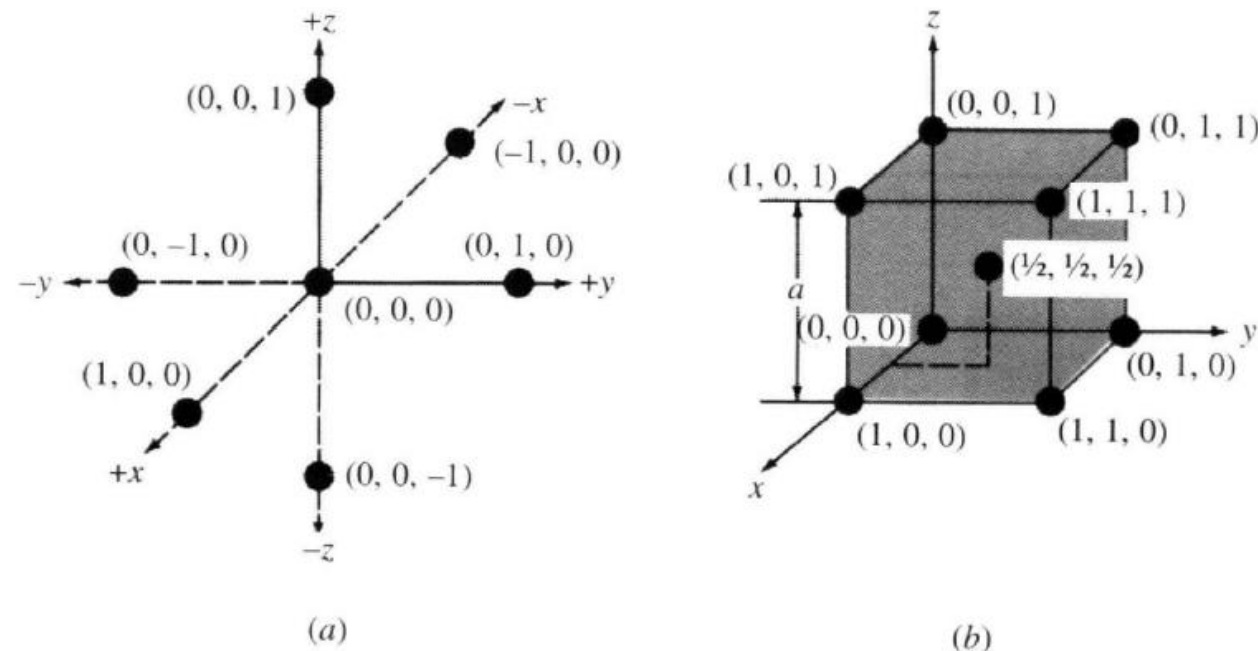



Figura 4.1 - (a) Eixos ortogonais x, y, z utilizados para localizar as posições dos átomos nas células unitárias cúbicas. (b) Posições atômicas numa célula unitária CCC.

- Fórmulas da distancia interplanar:

Distância Interplanar

A distância entre dois planos paralelos e adjacentes com os mesmos índices de Miller é chamada de distância interplanar. Para materiais com arranjos do tipo cúbico, a fórmula para essa distância é dada por:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Onde *a* é o parâmetro de rede da célula unitária e *h*, *k*, e *l* representam os índices de Miller dos planos considerados

- Figura 3.0: Distancia Interplanar para uma cela unitária Cúbica:

Tabela 1. Equações para o cálculo do volume da cela unitária com base nos parâmetros da cela unitária.

Sistema Cristalino	Características das Celas Unitárias	Volume
Cúbico	a = b = c $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a^3
Tetragonal	a = b ≠ c $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a^2 \cdot c$
Ortorrômbico	a ≠ b ≠ c $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a \cdot b \cdot c$
Hexagonal	a = b ≠ c $\alpha = \beta = 90^\circ$ e $\gamma = 120^\circ$	$\frac{\left(a^2 \cdot c \cdot \sqrt{3}\right)}{2} = 0.866 \cdot a^2 \cdot c$
Monoclínico	a ≠ b ≠ c $\alpha = \gamma = 90^\circ$; $\beta \neq 90^\circ$	$a \cdot b \cdot c \cdot sen\beta$
Triclínico	a ≠ b ≠ c $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	$a \cdot b \cdot c \begin{pmatrix} 1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + \\ 2 \cdot \cos\alpha \cdot \cos\beta \cdot \cos\gamma \end{pmatrix}^{1/2}$

- Figura 3.1: Distancia Interplanar para outras celas unitárias:

Sistema Cristalino	Distância Interplanar, d_{hkl}
Cúbico	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$
Tetragonal	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$
Ortorrômbico	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{k^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$
Hexagonal	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3}\left(\frac{h^2 + h \cdot k + k^2}{a^2}\right) + \frac{l^2}{c^2}$
Monoclínico	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{1}{sen^2\beta}\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2 \cdot sen^2\beta}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2 \cdot h \cdot l \cdot \cos\beta}{a \cdot c}\right) + \frac{l^2}{c^2}$
Triclínico	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{1}{V^2}\left[\begin{array}{l} h^2 \cdot b^2 \cdot c^2 \cdot sen^2\alpha + k^2 \cdot a^2 \cdot c^2 \cdot sen^2\beta \\ + l^2 \cdot a^2 \cdot b^2 \cdot sen^2\gamma + 2 \cdot h \cdot k \cdot a \cdot b \cdot c^2 \cdot (\cos\alpha \cdot \cos\beta - \cos\gamma) \\ + 2 \cdot k \cdot l \cdot a^2 \cdot b \cdot c \cdot (\cos\beta \cdot \cos\gamma - \cos\alpha) \\ + 2 \cdot h \cdot l \cdot a \cdot b^2 \cdot c \cdot (\cos\alpha \cdot \cos\gamma - \cos\beta) \end{array}\right]$

• Ângulos dos Cristais:

Geometria dos Cristais

Ângulos dos cristais:

representam as distâncias internas entre as arestas ou faces de um determinado cristal.

Tipos:

(α) **ângulos planos**: resulta do encontro de duas arestas;

(β) **ângulos diedros**: resultantes do encontro de duas faces, e

(γ) **ângulos sólidos**: resultantes do encontro de 3 ou mais faces

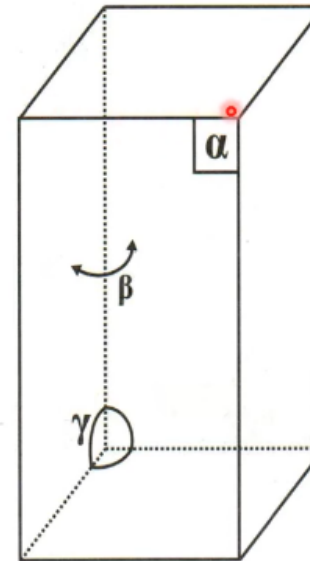
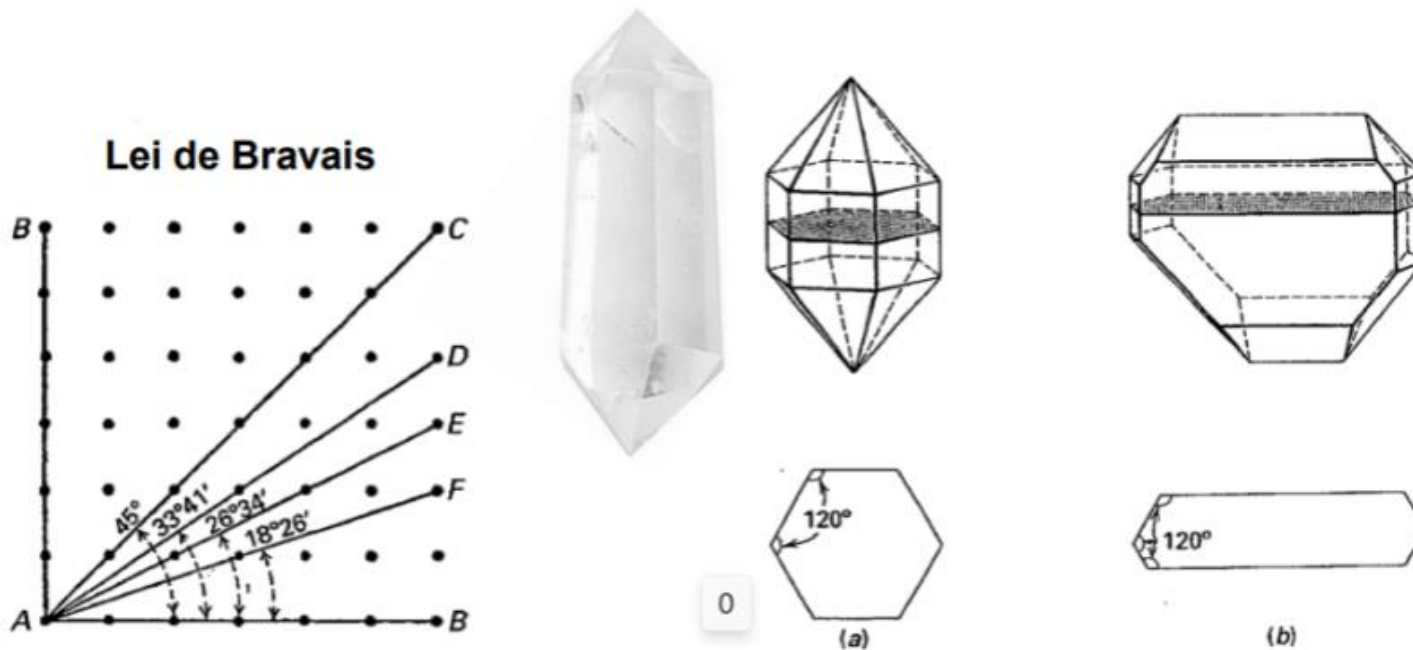



Figura 2.4 – Ângulos plano (α), diedro (β) e sólido (γ).

3)Lei da Constancia dos Ângulos diedros (interfaciais):

Figura 3.2: Nicolau Steno: Contribuidor ímpar em várias áreas do conhecimento dentre elas a geologia como cristalografia, mineralogia estratigrafia, etc.

Zonas:

Zonas são basicamente duas faces não paralelas quaisquer...

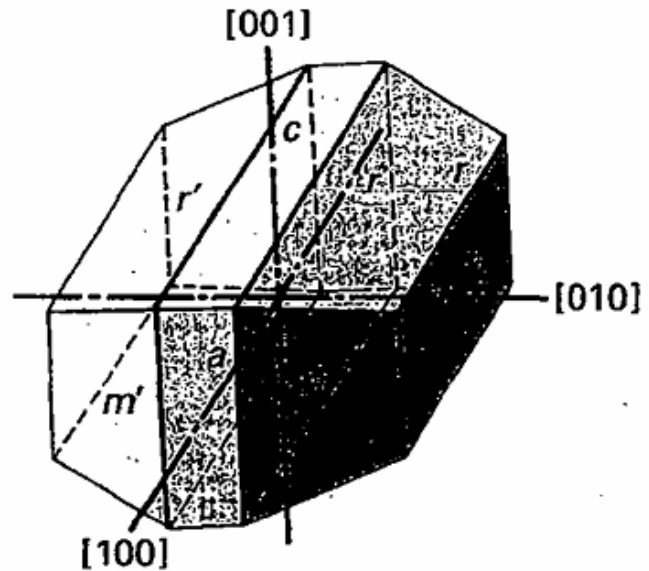
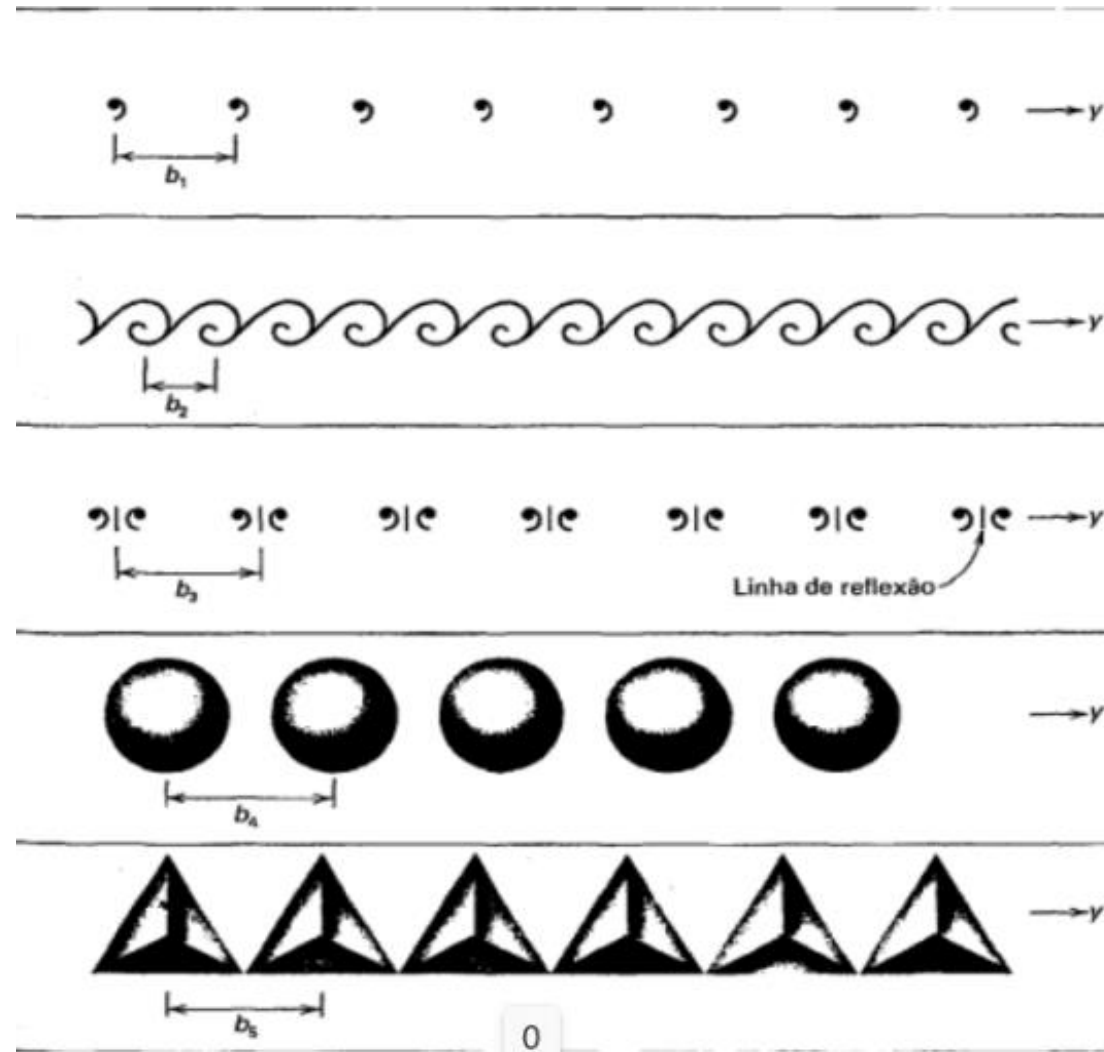



FIGURA 6.32 Zonas do cristal e eixos de zona indicados por índices de Miller entre colchetes. As interseções entre faces *m'*, *a*, *m* e *b* pertencem à zona [001] e as interseções das faces *r'*, *c*, *r* e *b* pertencem à zona [100].

Figura 3.3: **cálculo do eixo de zona**: Perceba que se trata basicamente de um produto vetorial onde são utilizados matrizes

- Simetria Unidimensional: **Fileira**

- **Os 10 grupos pontuais planos:**

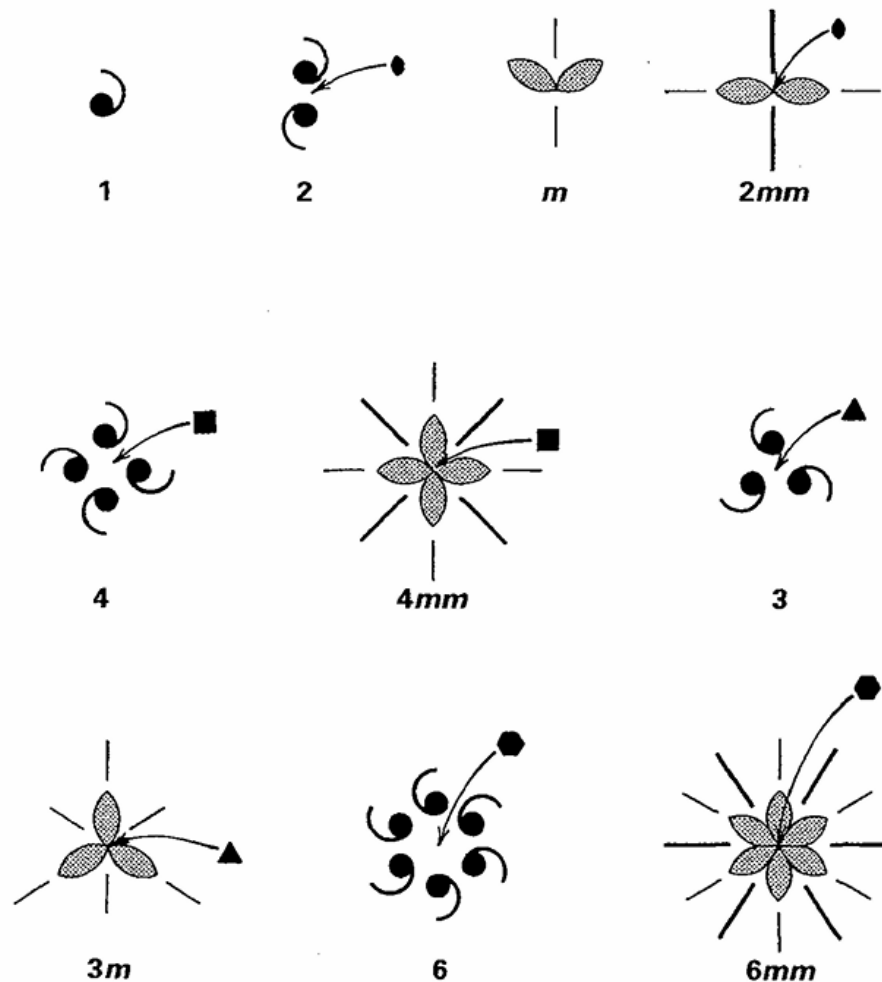
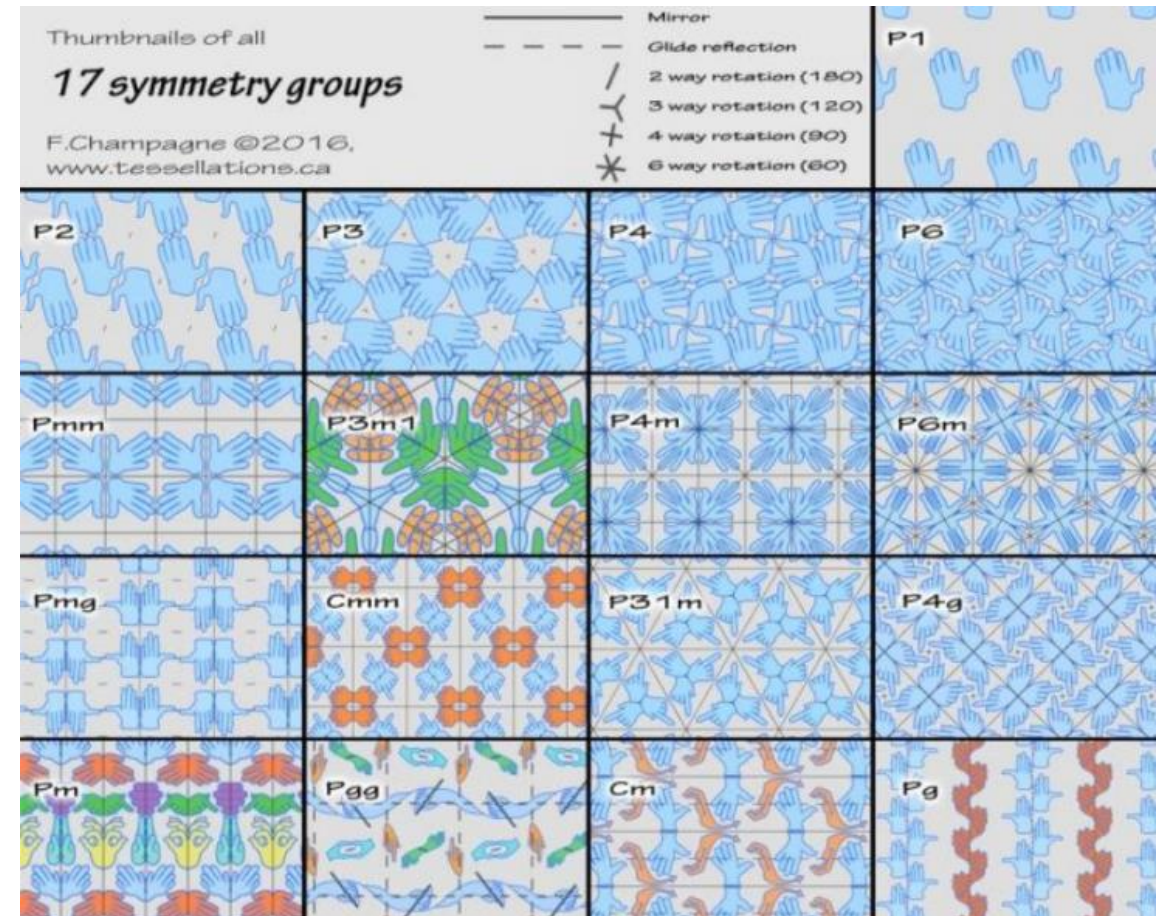
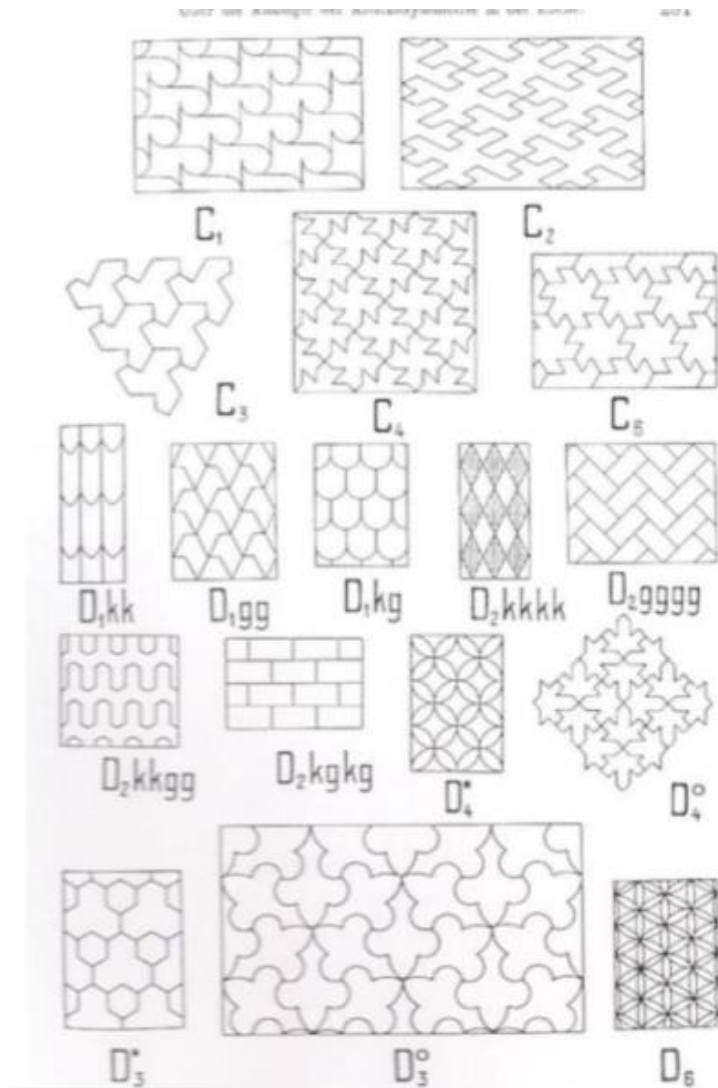
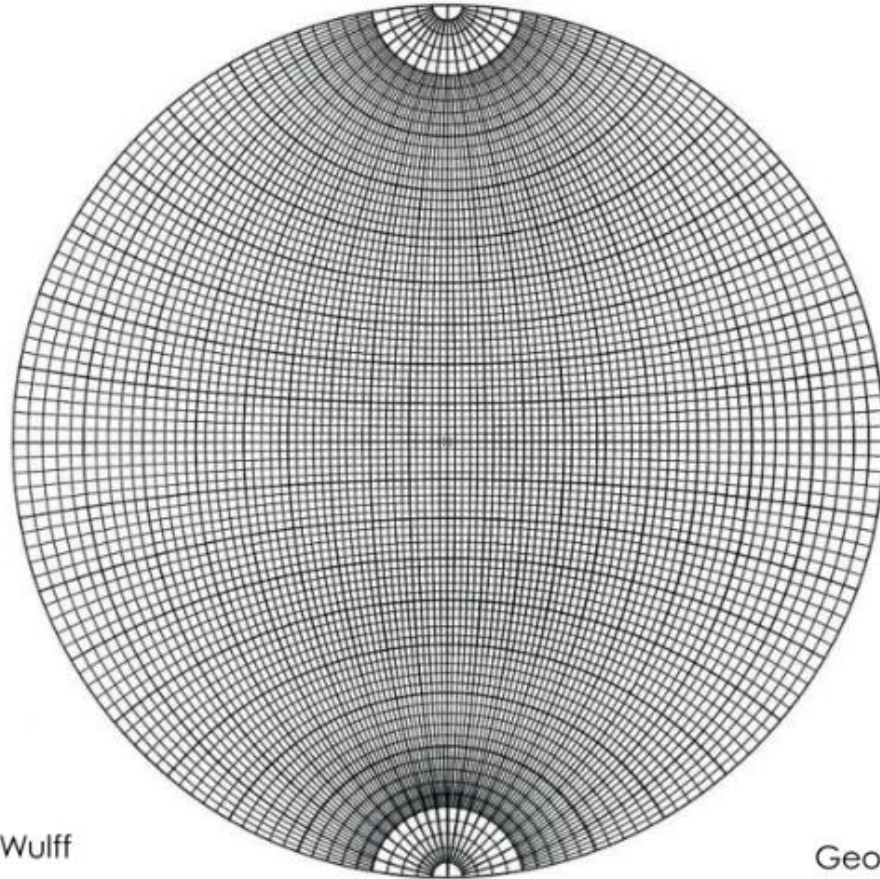
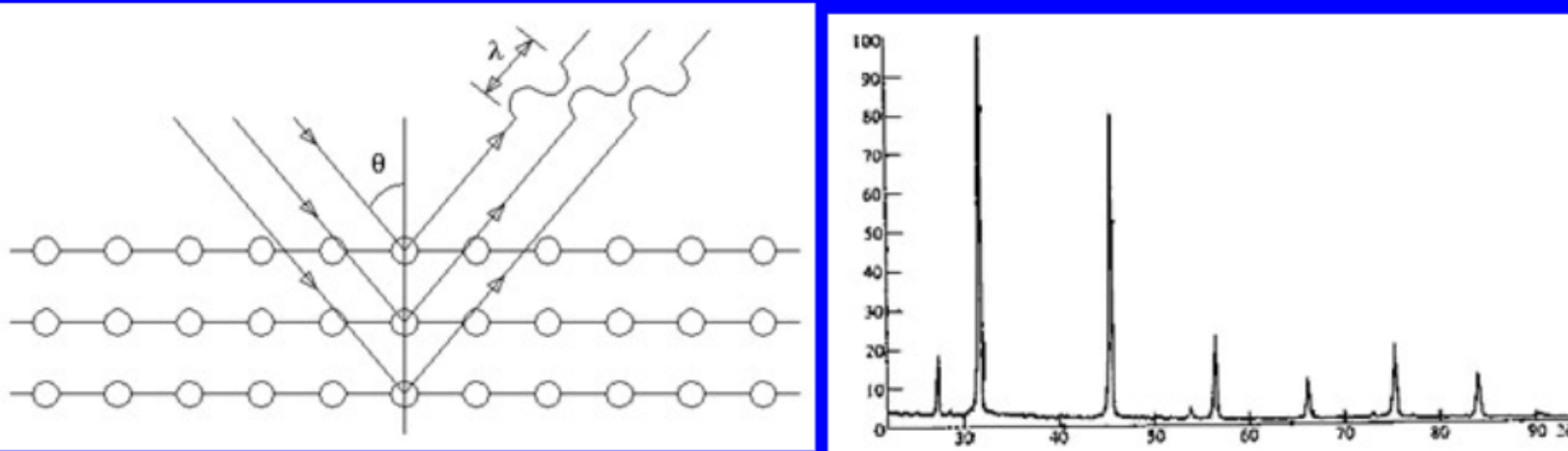



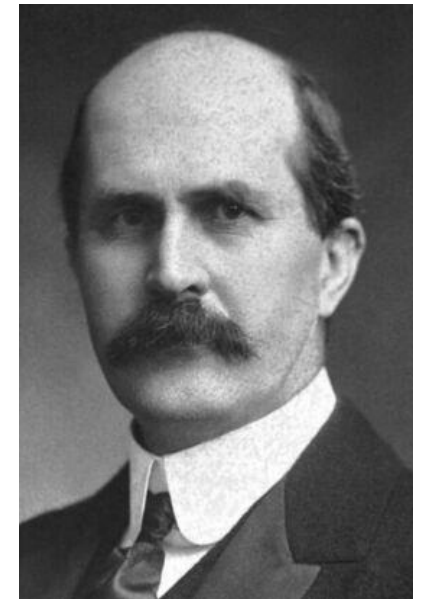
FIGURA 7.10 O conteúdo de simetria de motivos bidimensionais, designados por símbolos de Hermann-Mauguin. As locações das linhas especulares (*m*) são mostradas por meio de linhas sólidas e os eixos rotacionais pelos símbolos padrões.

- Grupos Planos Bidimensionais: (**Os 17 Grupos de Simetria**)

- Projeção Estereográfica: **Rede de Wulff**

4) Determinação da Estrutura de um Cristal:

- A estrutura de um cristal pode ser determinado pela análise de difratograma de raio X.
- É baseado no princípio de interferência de raios difratados de acordo com a lei de Bragg: $n\lambda = 2d\,\mathrm{sen}\,\theta$

Lei de Bragg: $n\lambda = 2d \sin\theta$

Onde n = número inteiro

$\lambda =$ Comprimento de onda

d=distancia entre as camadas atomicas de um cristal.

William Henry Bragg (1862 – 1942)

Conceitos de Cristalografia e Simetria aplicados no dia a dia.

- Sempre que andamos na rua, olhamos os ladrilhos da calçada, dos muros. Entramos em alguma loja e observamos os seus belos papéis de parede e em objetos tridimensionais em geral a nossas voltas, arquitetura, cenários de jogos etc. percebemos padrões geométricos de simetria e com os conhecimentos já adquiridos de cristalografia até aqui é possível apurar sua visão para tais padrões e admirar sua beleza de uma maneira mais especial ao contrário de leigos no assunto que simplesmente passam batidos por serem supostamente ''comuns'' quando na realidade apresentam uma profundidade muito maior e olhando sobre a ótica da cristalografia é possível admirá-las da melhor forma possível.

- Observe algumas Figuras abaixo das mais variadas formas e tipos e verifique se consegue identificar alguns elementos da cristalografia/simetria aprendidos até aqui:

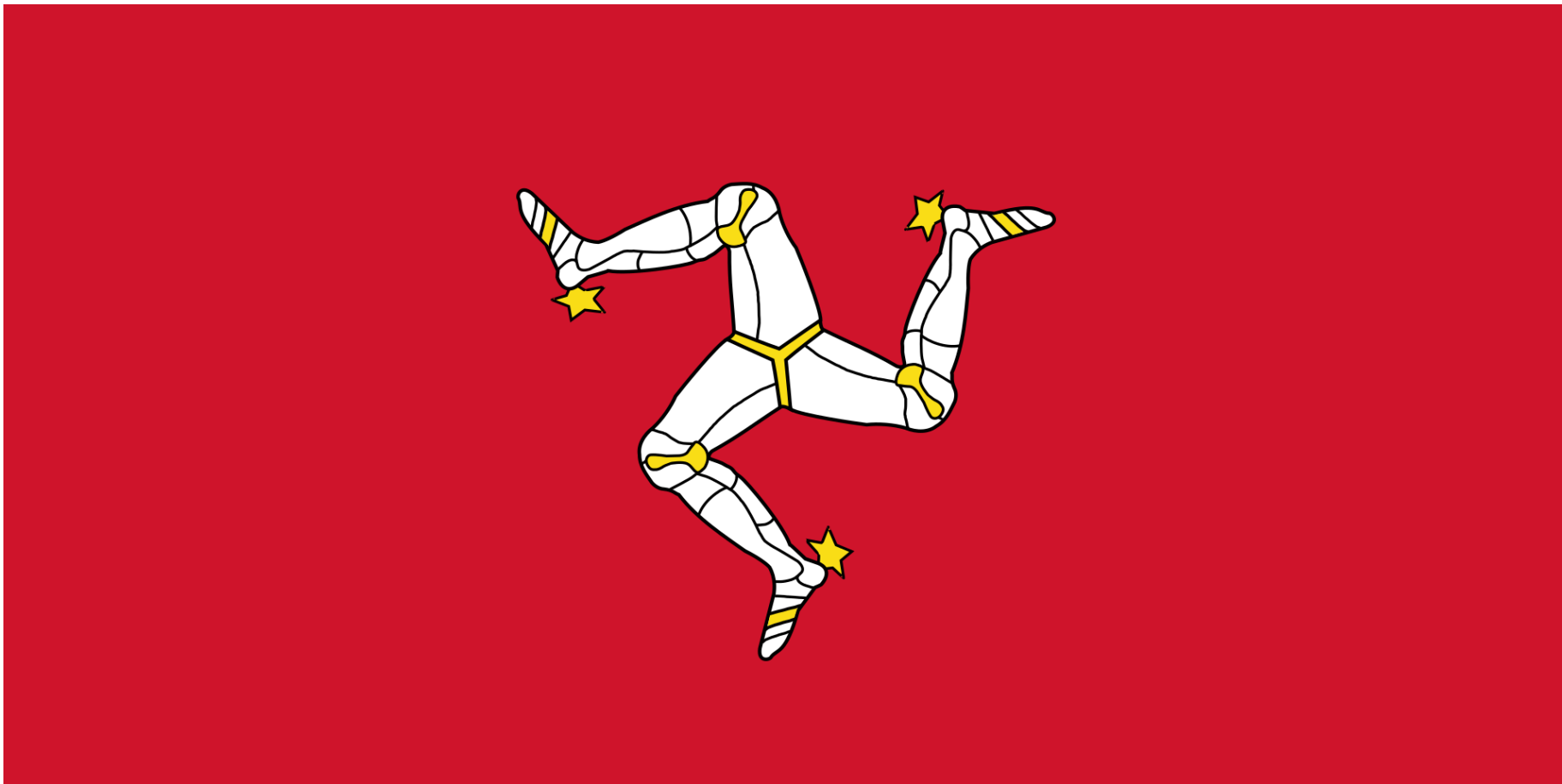



Figura: Bandeira da Ilha de Man (Isle of Man Flag)

Taj Mahal

Gopuram

Flower

Butterfly

Rangoli

Pinwheel

Clouds

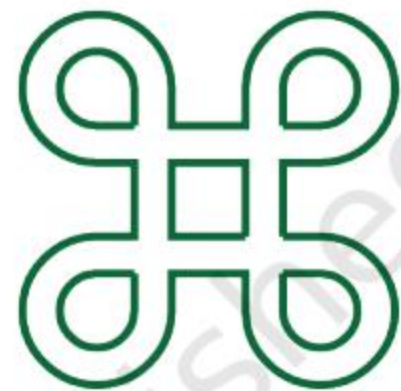
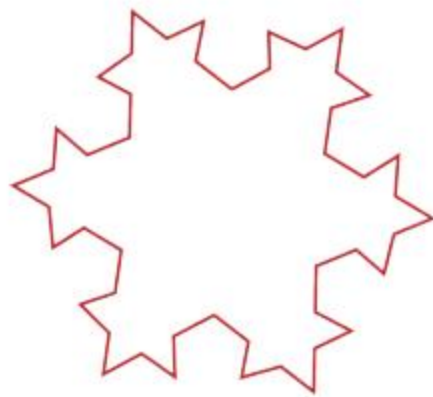



Figura: Mogeko Casttle (Cena de Game Over)

• Bibliografia:

- **Klein, C. (2018).** *Manual of Mineral Science* (23ª ed.). Wiley.
- WIKIPEDIA. *Rede de Bravais*. Disponível em: https://pt.wikipedia.org/wiki/Rede_de_Bravais. Acesso em: 24 dez. 2024.
- WIKIPEDIA. *Bandeira da Ilha de Man*. Disponível em: https://pt.wikipedia.org/wiki/Bandeira_da_Ilha_de_Man. Acesso em: 24 dez. 2024.
- BRASIL ESCOLA. *Os sólidos Platônicos*. Disponível em: https://brasilescola.uol.com.br/matematica/os-solidos-platao.htm. Acesso em: 24 dez. 2024.
- WIKIPEDIA. *Miller index*. Disponível em: https://en.wikipedia.org/wiki/Miller_index. Acesso em: 24 dez. 2024.
- UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO. *Direções e planos* (modificado). 2021. Disponível em: https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/5971297/mod_resource/content/1/Aula%20Direções%20e%20planos%20-%20Modificado.pdf. Acesso em: 24 dez. 2024.
- WIKIPEDIA. *William Hallowes Miller*. Disponível em: https://pt.wikipedia.org/wiki/William_Hallowes_Miller. Acesso em: 24 dez. 2024.
- WIKIPEDIA. *Crystal*. Disponível em: https://en.wikipedia.org/wiki/Crystal. Acesso em: 24 dez. 2024.
- UNICAMP. *Nicolau Steno: sólido contido no sólido*. 2018. Disponível em: https://www.blogs.unicamp.br/paleoblog/2018/05/04/nicolau-steno-solido-contido-no-solido/. Acesso em: 24 dez. 2024.
- WIKIPEDIA. *René Just Haüy*. Disponível em: https://pt.wikipedia.org/wiki/René_Just_Haüy. Acesso em: 24 dez. 2024.
- SLIDESHARE. *Rochas magmáticas*. Disponível em: https://pt.slideshare.net/slideshow/63-rochas-magmaticaspptx/256677913. Acesso em: 24 dez. 2024.
- SLIDESHARE. *Projeção cristalográfica: exercícios para resolver*. Disponível em: https://pt.slideshare.net/slideshow/projecao-cristalografica-exercicios-para-resolver/268724055. Acesso em: 24 dez. 2024.
- VEDANTU. *The shape of IF7 molecule is a pentagonal*. Disponível em: https://www.vedantu.com/question-answer/the-shape-of-if7-molecule-is-a-pentagonal-class-11-chemistry-cbse-5f836c60781fe74044e9e410. Acesso em: 24 dez. 2024.
- LQES/UNICAMP. *Vivência LQES: distâncias interplanares*. 2021. Disponível em: https://lqes.iqm.unicamp.br/images/vivencia_lqes_index_distancias_interplanares.pdf. Acesso em: 24 dez. 2024.
- WIKIPEDIA. *Cianite*. Disponível em: https://pt.wikipedia.org/wiki/Cianite. Acesso em: 24 dez. 2024.
- DAVID, Pedra. *Topázio*. 2010. Disponível em: https://pedra-david.blogspot.com/2010/09/topazio.html. Acesso em: 24 dez. 2024.
- GREGEM/UFES. *Curso Cristalografia I – Aula 2*. 2021. Disponível em: https://gregem.ufes.br/sites/gregem.ufes.br/files/field/anexo/Curso%20cristalografia%20I%20–%20aula%202_0.pdf. Acesso em: 24 dez. 2024.
- **AULAS DE GEOLOGIA _ UNIVAP** **Videoaula Cristalografia Morfológica**. 2021. Disponível em: https://www.youtube.com/watch?v=84hCF_5l1a4&t=4s. Acesso em: 25 dez. 2024.
- PINHEIRO, C. B. *Exercício de cristalografia: grupo ponto I*. 2021. Disponível em: http://www.labcri.ufmg.br/cbpinheiro/Cursos/Cristalografia/exercicio-grupopontol.pdf. Acesso em: 24 dez. 2024.
- TOMATO, Hanako. Mogeko Castle [jogo eletrônico]. Kyoto: Hanako Games, 2015.